

Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

Equilibrierung und Hydrodynamik in offenen Systemen



Bachelorarbeit
Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch
Zweitprüfer Priv.-Doz. Dr. Ralf Bulla

Eingereicht von Florian Lange
Matrikelnummer 5372089

Mai 2014, Köln

Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

Equilibrierung und Hydrodynamik in offenen Systemen

Bachelorarbeit

Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch

Zweitprüfer Priv.-Doz. Dr. Ralf Bulla

Eingereicht von Florian Lange

Matrikelnummer 5372089

Mai 2014, Köln

Inhaltsverzeichnis

1	Zusammenfassung	5
2	Motivation	6
3	Theoretische Grundlagen	7
3.1	Zweite Quantisierung	7
3.1.1	Fockraum	7
3.1.2	Bosonische Auf- und Absteigeoperatoren	7
3.1.3	Basiswechsel	8
3.1.4	Operatoren	8
3.2	Bose-Hubbard Modell	9
3.2.1	Bloch- und Wannier-Zustände	9
3.2.2	Hamiltonoperator	10
4	Quanten Quench im eindimensionalen Bose-Hubbard Modell	12
4.1	Ausgangskonfiguration	12
4.2	Energie der Doublon-Holon-Anregung	13
5	Zeitentwicklung mit Energieerhaltung	16
5.1	Thermisches Gleichgewicht	16
5.2	Diffusion	19
5.3	Energiefluktuationen	22
5.4	Skalentransformation	25
6	Numerik	27
7	Zeitentwicklung ohne Energieerhaltung	29
7.1	Diffusionsgleichung	31
7.2	Analytische Lösung	33
7.3	Asymptotische Verhalten	36
7.4	Auswirkung der Teilchendichte	38
8	Ausblick	39
9	Fazit	43
10	Anhang	45
10.1	Teil A	45
10.2	Teil B	49
	Literatur	53

1 Zusammenfassung

In [1] wurde ein schwacher Quanten Quench im eindimensionalen Bose-Hubbard Modell untersucht, bei dem die Wechselwirkungstärke U von unendlich auf einen großen endlichen Wert gesetzt wird. Im Ausgangszustand ist dabei jeder Gitterplatz einzeln besetzt. Nach dem Quench bilden sich Quasiteilchen in Form von doppelt und nicht besetzten Gitterplätzen, die durch Stöße das System in ein Gleichgewicht bringen. Es konnte numerisch gezeigt werden, dass das angeregte Vielteilchen-Quantensystem bei Energieerhaltung, jedoch ohne Impulserhaltung, langsam wie $t^{-1/2}$ mit Korrekturtermen proportional zu $t^{-3/4}$ thermalisiert. Energie muss diffusiv transportiert werden, um die neuen Fluktuationen im thermischen Gleichgewicht aufzubauen. Dies führt zu hydrodynamischen long-time tails, die besonders ausgeprägt waren in der Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ zwischen Teilchen i und Teilchen $i+n$.

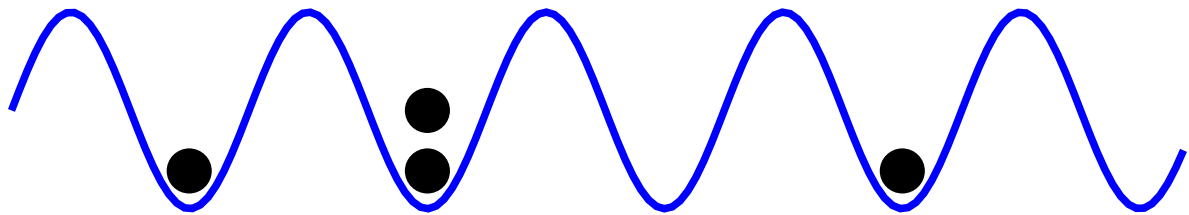
Wir betrachten hier die gleiche Ausgangssituation, jedoch ohne Energieerhaltung. Das numerische Protokoll wird erweitert, indem mit einer mittleren Rate τ^{-1} der Impuls und mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.5 auch die Teilchenart eines Quasiteilchens geändert wird. Die mittlere Energie der hinzugefügten Quasiteilchen ist dabei wie die mittlere Energie im Gesamtsystem Null. In dieser Arbeit wird gezeigt, dass durch Verletzung der Energieerhaltung algebraische long-time tails in der Observablen $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ zerstört werden können und das System exponentiell relaxieren kann. Weiter wird die Auswirkungen der Energiefluktuation auf die zeitliche Entwicklung des Systems in Abhängigkeit der Fluktuationsrate untersucht. Es erfolgt dazu ein Vergleich der numerischen Daten mit einer analytischen Lösung. Darüber hinaus wird auf die Frage eingegangen, inwieweit Teilchen- und Energietransport in diesem Modell koppeln.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Zunächst werden die Grundlagen der zweiten Quantisierung dargelegt, mit denen dann die Herleitung des Bose-Hubbard Modells erfolgt. Im nächsten Abschnitt werden die Energien der Anregungen und der Ausgangszustand nach dem Quench berechnet. Darauf erfolgt eine teilweise Reproduktion der Ergebnisse aus [1] und eine Beschreibung des verwendeten Programms. Im Anschluss werden die Ergebnisse ohne Energieerhaltung diskutiert. Den Abschluss bildet ein Ausblick auf mögliche weitere Problemstellungen, die an diese Arbeit anknüpfen könnten.

2 Motivation

Aufgrund neuer Verfahren ist es möglich experimentell zu untersuchen, wie und unter welchen Umständen ein Quantensystem equilibriert. Ein Weg, um einen angeregten Zustand in einem Quantensystem zu erreichen, besteht darin, das System zunächst in seinem Grundzustand zu präparieren und dann durch plötzliche Änderung äußerer Parameter aus dem Gleichgewicht zu bringen. Dies wird als Quanten Quench bezeichnet und kann experimentell durch ultrakalte Atome in optischen Gittern realisiert werden [2].

Ein optisches Gitter ist ein durch Interferenz von Laserstrahlen erzeugtes periodisches Potential, in welchem neutrale Atome in Abhängigkeit der Laserfrequenz ω gegenüber der atomaren Anregungsfrequenz ω_0 zu den Intensitätsmaxima ($\omega < \omega_0$) beziehungsweise zu den Intensitätsminima ($\omega > \omega_0$) hingezogen werden. Die Frequenz wird dabei so gewählt, dass Anregungs- und Emissionseffekte vernachlässigbar sind ($\omega \ll \omega_0$ bzw. $\omega \gg \omega_0$) [3]. Im eindimensionalen Fall kann ein optisches Gitter durch zwei gegenläufige Laserstrahlen gleicher Frequenz und Amplitude erzeugt werden, die sich zu einer stehenden Welle überlagern. Die Gitterkonstante ist dann in dieser Anordnung durch $\lambda/2$ gegeben, wobei λ die Wellenlänge des Laserlichts bezeichnet. Das Potential ist Resultat der Wechselwirkung des durch das Laserlicht in den Atomen induzierten oszillierenden elektrischen Dipolmoments mit der elektromagnetischen Strahlung, welche zu einer als AC-Stark bezeichneten Energieaufspaltung führt. Diese ist bei einer periodisch ortsabhängigen Intensitätsverteilung ebenfalls periodisch im Ort und bildet das optische Gitterpotential [2].



Die Tiefe des Potentials ist dabei abhängig von der Intensität des Laserlichtes. Werden die Atome auf Nano-Kelvin Temperaturen abgekühlt, können sie in den Potentialtälern gefangen werden [4]. Neben der Potentialtiefe sind die Gitterkonstanten durch die Geometrie der Laserstrahlen und die Wechselwirkungsstärke durch ein äußeres Magnetfeld variabel einstellbar. Der große Nutzen von optischen Gittern liegt in der Möglichkeit, physikalische Modelle unter idealisierten Bedingungen, wie sie im realen Festkörper nicht zu erreichen sind, experimentell zu untersuchen, sowie in der Regulierbarkeit von Gitterstruktur, Bindungsstärke und Wechselwirkungsverhalten [3]. Die Energieskalen im optischen Gitter entsprechen allerdings nicht denen in realen Festkörpern. Auch sind die typischen Gitterkonstanten in realen Festkörpern 3 bis 4 Größenordnungen kleiner. Ein bei optischen Gittern zunächst unerwünschter Effekt ist der Verlust von Teilchen, die zum Beispiel nach Absorption eines Photons des Lasers oder nach Streuung an Gasatomen aus dem Gitterpotential entfliehen können. In dieser Arbeit wird untersucht, welche Auswirkungen die Verletzung der Energieerhaltung auf die Relaxation eines Vielteilchensystems hat.

3 Theoretische Grundlagen

3.1 Zweite Quantisierung

3.1.1 Fockraum

Der Hilbertraum $\mathcal{H}_n^s$ eines Systems von n ununterscheidbaren Bosonen ist gegeben als symmetrischer Teilraum des Tensorprodukts der n Ein-Teilchen-Hilberträume $\mathcal{H}_1$ [5].

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1$$

$$\mathcal{H}_n^s = \left\{ |\psi\rangle \in \mathcal{H}_n \mid P|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \forall P \in S_n \right\}$$

Dabei bezeichnet P ein Permutationselement der symmetrischen Gruppe S_n . Eine Wellenfunktion $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_n^s$ hat die allgemeine Form

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n! \prod_i n_{\lambda_i}!}} \sum_{\sigma \in S_n} \varphi_{\lambda_{\sigma(1)}}(x_1) \dots \varphi_{\lambda_{\sigma(n)}}(x_n),$$

mit φ_{λ_i} den Einteilchenwellenfunktionen im Zustand λ_i , n_{λ_i} der Besetzungszahl des Zustands λ_i und n der Gesamtteilchenzahl. Bei einem quantenmechanischen Vielteilchensystem ist es sinnvoller von der Beschreibung aller möglichen Permutationen zu einer Basis überzugehen, die nur die Besetzungszahlen der einzelnen Zustände zählt: $|n_{\lambda_1}, \dots, n_{\lambda_i}, \dots\rangle \in \mathcal{F}_n = \mathcal{H}_n^s$. Der zugehörige Raum für variable Teilchenzahl ist der sogenannte Fockraum

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots$$

mit dem eindimensionalen Raum $\mathcal{F}_0$ des Vakuumzustandes $|0, \dots, 0, \dots\rangle$. Ein Zustand in $\mathcal{F}_n$ ist von der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{\{n_i\} \\ \sum_i n_i = n}} c_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle.$$

3.1.2 Bosonische Auf- und Absteigeoperatoren

In Analogie zum Harmonischen Oszillator lassen sich auch für ein Vielteilchensystem Auf- und Absteigeoperatoren definieren.

$$\hat{\mathbf{a}}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle := \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (3.1)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle := \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (3.2)$$

Diese Operatoren erfüllen die folgenden bosonischen Kommutatorrelationen:

$$[\hat{\mathbf{a}}_i, \hat{\mathbf{a}}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{\mathbf{a}}_i, \hat{\mathbf{a}}_j] = 0, \quad [\hat{\mathbf{a}}_i^\dagger, \hat{\mathbf{a}}_j^\dagger] = 0 \quad (3.3)$$

Weiter lässt sich der Besetzungszahloperator $\hat{\mathbf{n}}_i := \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_i$ einführen, der folgende Eigenschaft besitzt:

$$\hat{\mathbf{n}}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$$

3.1.3 Basiswechsel

Es bezeichnet $\{|\lambda\rangle\}$ eine Basis von Einteilchenzuständen und $\hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger, \hat{\mathbf{a}}_\lambda$ die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Ist $\{|\nu\rangle\}$ eine weitere Basis von Einteilchenzuständen, so kann ein Basiswechsel erfolgen durch

$$|\nu\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle\lambda|\nu\rangle \quad |\lambda\rangle = \sum_\nu |\nu\rangle \langle\nu|\lambda\rangle.$$

Die Transformation der Auf- und Absteigeoperatoren soll gewährleisten, dass $|\nu\rangle = \hat{\mathbf{a}}_\nu^\dagger |0\rangle$ gilt.

$$|\nu\rangle = \hat{\mathbf{a}}_\nu^\dagger |0\rangle = \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle\lambda|\nu\rangle = \sum_\lambda \langle\lambda|\nu\rangle \hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger |0\rangle$$

Daraus folgt die Beziehung

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^\dagger = \sum_\lambda \langle\lambda|\nu\rangle \hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger \quad \hat{\mathbf{a}}_\nu = (\hat{\mathbf{a}}_\nu^\dagger)^\dagger = \sum_\lambda \langle\nu|\lambda\rangle \hat{\mathbf{a}}_\lambda. \quad (3.4)$$

3.1.4 Operatoren

Ist $\hat{\mathbf{o}}$ ein Einteilchenoperator und $\{|\lambda\rangle\}$ eine Basis in der $\hat{\mathbf{o}}$ orthogonal ist, sowie λ_i die zu den Eigenzuständen $|\lambda_i\rangle$ zugehörigen Eigenwerte, dann lässt sich $\hat{\mathbf{o}}$ wie folgt schreiben:

$$\hat{\mathbf{o}} = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle\lambda_i|$$

Wendet man den Operator $\hat{\mathbf{O}}_1 = \sum_j \hat{\mathbf{o}}_j^{(1)}$ auf einen Vielteilchenzustand $|n_{\lambda_1}, \dots\rangle$ an, muss bei den Eigenzuständen $|\lambda_i\rangle$ nur noch die Besetzungszahl n_{λ_i} berücksichtigt werden.

$$\hat{\mathbf{O}}_1 |n_{\lambda_1}, \dots\rangle = \sum_i \lambda_i n_{\lambda_i} |n_{\lambda_1}, \dots\rangle = \sum_i \lambda_i \hat{\mathbf{a}}_{\lambda_i}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{\lambda_i} |n_{\lambda_1}, \dots\rangle = \sum_i \langle\lambda_i|\hat{\mathbf{o}}^{(1)}|\lambda_i\rangle \hat{\mathbf{a}}_{\lambda_i}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{\lambda_i} |n_{\lambda_1}, \dots\rangle$$

Dabei ist $\hat{\mathbf{o}}_j$ ein Einteilchenoperator, der auf das j-te Teilchen wirkt.

Eine Transformation zu einer beliebigen Basis $\{|\nu\rangle\}$ liefert die folgende Darstellung:

$$\hat{\mathbf{O}}_1 = \sum_i \sum_{m,n} \langle \nu_n | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \hat{\mathbf{o}}^{(1)} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \nu_m \rangle \hat{\mathbf{a}}_{\nu_n}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{\nu_m} = \sum_{m,n} \langle \nu_n | \hat{\mathbf{o}}^{(1)} | \nu_m \rangle \hat{\mathbf{a}}_{\nu_n}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{\nu_m} \quad (3.5)$$

Für einen Zweiteilchenoperator $\hat{\mathbf{O}}_2 = \sum_{ij} \hat{\mathbf{o}}_{ij}^{(2)}$ erhält man in zweiter Quantisierung [5] :

$$\hat{\mathbf{O}}_2 = \sum_{\lambda, \lambda', \mu, \mu'} \langle \lambda, \lambda' | \hat{\mathbf{o}}^{(2)} | \mu, \mu' \rangle \hat{\mathbf{a}}_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{\lambda'}^\dagger \hat{\mathbf{a}}_\mu \hat{\mathbf{a}}_{\mu'} \quad (3.6)$$

3.2 Bose-Hubbard Modell

Das Bose-Hubbard Modell beschreibt miteinander wechselwirkende Bosonen in einem periodischen Potential, wobei die Bosonen auf benachbarte Gitterplätze springen können. Zur Herleitung des Modells in einer Dimension betrachten wir ein Gitter der Länge L mit N Gitterpunkten und mit Gitterkonstante a. Der Hamiltonoperator von n Teilchen in einem periodischen Potential $V(x)$ und mit Wechselwirkungspotential $U(x_i, x_j)$ ist gegeben durch

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{i=1}^n \underbrace{\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V(x_i) \right)}_{\hat{\mathbf{h}}_i^{(1)}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \underbrace{U(x_i, x_j)}_{\hat{\mathbf{h}}_{ij}^{(2)}}.$$

Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die Energie der Teilchen klein ist gegenüber der Bandlücke zum ersten angeregten Zustand und sich das Modell somit auf das Ein-Band-Hubbard Modell reduziert.

3.2.1 Bloch- und Wannier-Zustände

Wegen der Periodizität von $V(x)$ sind Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonoperators $\hat{\mathbf{h}}^{(1)}$ durch Bloch-Funktionen $\varphi_{n,k}(x)$ mit Impuls $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ und Bandindex n gegeben [2].

$$\varphi_{n,k}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} u_{n,k}(x)$$

Ist R ein Gittervektor, so erfüllt die Funktion $u_{n,k}(x)$ die Bedingung $u_{n,k}(x + R) = u_{n,k}(x)$. Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für einen Bloch-Zustand sind mit $\hat{\mathbf{c}}_{n,k}^\dagger$ und $\hat{\mathbf{c}}_{n,k}$ bezeichnet. Die Bloch-Funktionen bilden eine Orthonormalbasis [6].

$$\sum_k \varphi_{n,k}^*(x) \varphi_{n,k}(x') = \delta(x - x')$$

Durch Fouriertransformation erhält man aus den Bloch-Wellen die im Ortsraum lokalisierten Wannier-Zustände. Für das niedrigste Band ($n=1$) definieren wir

$$\phi(x - R_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} \varphi_k(x),$$

wobei der Bandindex für $n=1$ im Folgenden nicht mehr angegeben wird. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ein Teilchen am Gitterplatz R_i ergeben sich nach diskreter Fouriertransformation zu

$$\hat{\mathbf{a}}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_i} \hat{\mathbf{c}}_k^\dagger, \quad \hat{\mathbf{a}}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_i} \hat{\mathbf{c}}_k.$$

3.2.2 Hamiltonoperator

Im Formalismus der zweiten Quantisierung lassen sich Ein- und Zweiteilchenoperator in der Wannier-Basis darstellen. Dabei gehen wir von der Annahme aus, dass alle Energien klein sind gegenüber der ersten Bandlücke, sodass nur das niedrigste Band mit $n=1$ betrachtet werden kann.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}^{(1)} &= \sum_{ij} \langle R_i | \hat{\mathbf{h}}^{(1)} | R_j \rangle \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_j + \text{h.c.} \\ \hat{\mathbf{H}}^{(2)} &\approx \sum_{ijkl} \langle R_i, R_j | \hat{\mathbf{h}}^{(2)} | R_k, R_l \rangle \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_j^\dagger \hat{\mathbf{a}}_k \hat{\mathbf{a}}_l \end{aligned}$$

Dabei sind die Matrixelemente gegeben durch

$$J_{ij} = \langle R_i | \hat{\mathbf{h}}^{(1)} | R_j \rangle = \int dx \phi^*(x - R_i) \hat{\mathbf{h}}^{(1)} \phi(x - R_j)$$

$$U_{ijkl} = \langle R_i, R_j | \hat{\mathbf{h}}^{(2)} | R_k, R_l \rangle = \int dx \int dx' \phi^*(x - R_i) \phi^*(x' - R_j) \hat{\mathbf{h}}^{(2)} \phi(x' - R_k) \phi(x - R_l).$$

Unter der Annahme, dass der Überlapp zweier Wellenfunktionen ϕ_i und ϕ_j klein ist, lässt sich das Modell vereinfachen, indem die Wechselwirkung auf einzelne Gitterplätze und der Bewegungsfreiheitsgrad auf nächste Nachbarn beschränkt wird. Weiter gilt für ein homogenes System, dass sowohl der Wechselwirkungsterm U_{ijkl} als auch das Hüpfmatrixelement J_{ij} unabhängig vom Gitterplatz sind. Insgesamt erhalten wir unter diesen Annahmen für die Matrixelemente:

$$J_{ij} = J \delta_{ij} \quad U_{ijkl} = \begin{cases} U & i = j = k = l \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Der Hamiltonoperator des Bose-Hubbard Modells ergibt sich in der gewählten Basis zu

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}} &= -J \sum_i (\hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{i+1} + \hat{\mathbf{a}}_i \hat{\mathbf{a}}_{i+1}^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_i \hat{\mathbf{a}}_i \\ &= -J \sum_i (\hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{i+1} + \hat{\mathbf{a}}_i \hat{\mathbf{a}}_{i+1}^\dagger) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{\mathbf{n}}_i (\hat{\mathbf{n}}_i - 1).\end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt die bosonische Kommutatorrelation (3.3) ausgenutzt.

4 Quanten Quench im eindimensionalen Bose-Hubbard Modell

Unter einem Quanten Quench versteht man die Zeitentwicklung eines Zustandes nach einer plötzlichen Änderung des Hamiltonoperators $\hat{\mathbf{H}} \rightarrow \hat{\mathbf{H}}'$. Befindet sich das System vor dem Quench im Grundzustand $|\psi_0\rangle$, ist seine zeitliche Entwicklung nach dem Quench gegeben durch die formale Lösung der Schrödingergleichung bezüglich des neuen Hamiltonoperators $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}'t} |\psi_0\rangle$, wobei $|\psi_0\rangle$ im Allgemeinen kein Eigenzustand von $\hat{\mathbf{H}}'$ ist [7]. Hier wird ein Quanten Quench im eindimensionalen Bose-Hubbard Modell betrachtet, bei dem der Wechselwirkungsterm U von $U = \infty$ mit $n_i = 1$ auf einen endlichen Wert mit $U \gg J$ gesetzt wird.

$$\hat{\mathbf{H}} = \underbrace{-J \sum_i \hat{\mathbf{a}}_i^\dagger \hat{\mathbf{a}}_{i+1} + \hat{\mathbf{a}}_i \hat{\mathbf{a}}_{i+1}^\dagger}_{\hat{\mathbf{H}}_1} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_i \hat{\mathbf{n}}_i (\hat{\mathbf{n}}_i - 1)}_{\hat{\mathbf{H}}_0} - U \quad (4.7)$$

Der zusätzliche Term $-U$ bewirkt nur eine Verschiebung des Energiespektrums, ändert jedoch nicht die Physik des Systems. Aufgrund des endlichen Wechselwirkungsterms besteht die Möglichkeit, dass Atome auf benachbarte Gitterplätze hüpfen und somit leere und doppelt besetzte Plätze entstehen. Diese als Quasiteilchen bezeichneten Anregungen werden im Fall einer doppelten Besetzung Doublonen und im Fall keiner Besetzung Holonen genannt. Anregungen mit mehr als zwei Atomen an einem Gitterplatz sind wegen $U \gg J$ vernachlässigbar. Zur Berechnung der Anregungsenergien betrachten wir ein eindimensionales Gitter der Länge L im Limes $L \rightarrow \infty$ mit Gitterkonstante $a=1$.

4.1 Ausgangskonfiguration

Es bezeichnet $|0\rangle$ den Zustand, bei dem jeder Gitterplatz einzeln besetzt ist und $|R, r\rangle$ den Zustand einer Doublon-Holon-Anregung mit

$$R = \frac{r_d + r_h}{2}, \quad r = r_d - r_h$$

den Schwerpunkts- und Relativkoordinaten des Doublon-Holon-Paares. Die Zustände $\{|0\rangle, \{|R, r\rangle\}\}$ bilden eine Orthonormalbasis des Teilraums der Einzelanregungen und des Ausgangszustandes. Durch diskrete Fouriertransformation erhält man aus den Zuständen $|R, r\rangle$ die Zustände $|K, q\rangle$ mit Gesamtimpuls K und Relativimpuls q .

$$K = q_d + q_h, \quad q = \frac{q_d - q_h}{2}$$

$$|K, q\rangle = \frac{1}{L} \sum_R \sum_r e^{iKR} \sin(q|r|) |R, r\rangle$$

Dabei ist die Gesamtanzahl der Zustände $L(L-1) \approx L^2$. Bei der Transformation wurde die Randbedingung berücksichtigt, dass es keine Doublon-Holon-Anregung mit Relativkoordinate $r=0$ geben kann.

Um Aussagen über den Zustand nach dem Quench treffen zu können, betrachten wir zunächst das Matrixelement $\langle K, r | \hat{\mathbf{H}} | 0 \rangle$. Es gilt für $|r| > 1$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} |K, r\rangle &\sim \hat{\mathbf{H}} \left(\sum_R e^{iKR} |R, r\rangle \right) \\ &= -J \sum_R e^{iKR} \left(2 \left| R + \frac{1}{2}, r+1 \right\rangle + 2 \left| R - \frac{1}{2}, r-1 \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left| R - \frac{1}{2}, r+1 \right\rangle + \left| R + \frac{1}{2}, r-1 \right\rangle \right) \\ &\sim -J \left[\left(2e^{-\frac{iK}{2}} + e^{\frac{iK}{2}} \right) |K, r+1\rangle + \left(2e^{\frac{iK}{2}} + e^{-\frac{iK}{2}} \right) |K, r-1\rangle \right]. \end{aligned}$$

Hier wurde bei der Verschiebung der Schwerpunktskoordinate die Translationsinvarianz des Systems ausgenutzt. Die Vorfaktoren ergeben sich durch die Anwendung der bosonischen Auf- und Absteigeoperatoren (3.2) und (3.3). Für $|r| > 1$ gilt aufgrund der Orthogonalität der Basis $\langle K, r | \hat{\mathbf{H}} | 0 \rangle = 0$.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} |0\rangle &= -U |0\rangle - \sqrt{2}J \sum_{\substack{R \\ |r|=1}} e^{iR0} (|R, 1\rangle + |R, -1\rangle) \\ &= -U |0\rangle - \sqrt{2L}J (|K=0, 1\rangle + |K=0, -1\rangle) \end{aligned}$$

Insgesamt erhält man $\langle K, r | \hat{\mathbf{H}} | 0 \rangle \propto \delta_{K,0} \delta_{|r|,1}$, das heißt, Doublon-Holon-Paare entstehen nach dem Quench ausgehend vom Zustand $|0\rangle$ nur auf benachbarten Gitterplätzen mit Gesamtimpuls $K=0$.

4.2 Energie der Doublon-Holon-Anregung

Die Energie der Doublon-Holon-Anregung lässt sich wegen $U \gg J$ mittels Störungstheorie berechnen. Dazu betrachten wir die Basis $\{|0\rangle, \{|K=0, q\rangle\}\}$.

$$\hat{\mathbf{H}}_0 |K=0, q\rangle = 0 \quad \hat{\mathbf{H}}_0 |0\rangle = -U |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}}_1 |K=0, q\rangle &= \hat{\mathbf{H}}_1 \left(\frac{1}{L} \sum_R \sum_{\substack{r \\ |r|>1}} \sin(q|r|) |R, r\rangle + \frac{1}{L} \sum_{\substack{R \\ |r|=1}} \sin(q) (|R, 1\rangle + |R, -1\rangle) \right) \\
&= -\frac{J}{L} \left[\sum_R \sum_{\substack{r \\ |r|>1}} \sin(q|r|) \left(2 \left| R + \frac{1}{2}, r+1 \right\rangle + 2 \left| R - \frac{1}{2}, r-1 \right\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left| R + \frac{1}{2}, r-1 \right\rangle + \left| R - \frac{1}{2}, r+1 \right\rangle \right) \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\substack{R \\ |r|=1}} \sin(q) \left(2\sqrt{2} |0\rangle + 2 \left| R + \frac{1}{2}, 2 \right\rangle + 2 \left| R - \frac{1}{2}, -2 \right\rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left| R - \frac{1}{2}, 2 \right\rangle + \left| R + \frac{1}{2}, -2 \right\rangle \right) \right] \\
&= -\frac{2\sqrt{2}J}{L} \sum_{\substack{R \\ |r|=1}} \sin(q) |0\rangle - \frac{3J}{L} \sum_R \sum_r \left(\sin(q|(r-1)|) + \sin(q|(r+1)|) \right) |R, r\rangle \\
&= -2\sqrt{2}J \sin(q) |0\rangle - \frac{6J}{L} \cos(q) \sum_R \sum_r e^{iR0} \sin(q|r|) |R, r\rangle \\
&= -2\sqrt{2}J \sin(q) |0\rangle - 6J \cos(q) |K=0, q\rangle
\end{aligned}$$

Hier ist das Additionstheorem $\sin(\alpha) + \sin(\beta) = 2 \sin\left(\frac{\alpha+\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha-\beta}{2}\right)$ verwendet worden. In erster Ordnung Störungstheorie ergibt sich für die Energien und Eigenzustände

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | \hat{\mathbf{H}}_1 | 0 \rangle = 0$$

$$E_q^{(1)} = \langle K=0, q | \hat{\mathbf{H}}_1 | K=0, q \rangle = -6J \cos(q)$$

$$\begin{aligned}
|0^{(1)}\rangle &= \sum_q |K=0, q\rangle \frac{\langle K=0, q | \hat{\mathbf{H}}_1 | 0 \rangle}{E_0^{(0)} - E_q^{(0)}} = \frac{2\sqrt{2}J}{U} \sum_q \sin(q) |K=0, q\rangle \\
|K=0, q^{(1)}\rangle &= \sum_{\substack{q' \\ q' \neq q}} |K=0, q'\rangle \frac{\langle K=0, q' | \hat{\mathbf{H}}_1 | K=0, q \rangle}{E_q^{(0)} - E_{q'}^{(0)}} + |0\rangle \frac{\langle 0 | \hat{\mathbf{H}}_1 | K=0, q \rangle}{E_q^{(0)} - E_0^{(0)}} = -\frac{2\sqrt{2}J}{U} \sin(q) |0\rangle.
\end{aligned}$$

Die zweite Ordnung ist für die kinetische Energie der Doublonen und Holonen wegen $U \gg J$ vernachlässigbar.

$$E_0^{(2)} = \langle 0 | H_1 | 0^{(1)} \rangle = \sum_q \frac{|\langle K=0, q | H_1 | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_q^{(0)}} = -\frac{8J^2}{U} \sum_q \sin^2(q) = -\frac{4J^2}{U} L$$

$$E_q^{(2)} = \langle K=0, q | H_1 | K=0, q^{(1)} \rangle = \frac{8J^2}{U} \sin^2(q)$$

Die kinetische Energie eines Doublon-Holon-Paares mit Relativimpuls q ist $\epsilon_q \approx -6J \cos(q)$. Dabei entspricht der Impuls q wegen $K=0$ betragsmäßig dem Holon- beziehungsweise Doublon-impuls. Eine analoge Rechnung wie oben mit der Basis $\{|0\rangle, \{|r_d, r_h\rangle\}\}$ zeigt, dass die Dispersionsrelation von Doublon und Holon durch $\epsilon_q^d \approx -4J \cos(q)$ beziehungsweise $\epsilon_q^h \approx -2J \cos(q)$ gegeben ist. Die zugehörigen Geschwindigkeiten ergeben sich mit $J=1$ und $\hbar=1$ zu $v^d = \partial_q \epsilon_q^d = 4 \sin(q)$ und $v^h = \partial_q \epsilon_q^h = 2 \sin(q)$. Bezeichnet man die neuen Eigenzustände durch $|\tilde{0}\rangle$ und $|\widetilde{K=0, q}\rangle$, so erhält man für den Ausgangszustand $\psi_{ini} = |0\rangle \approx |\tilde{0}\rangle - |\widetilde{0^{(1)}}\rangle$ und somit

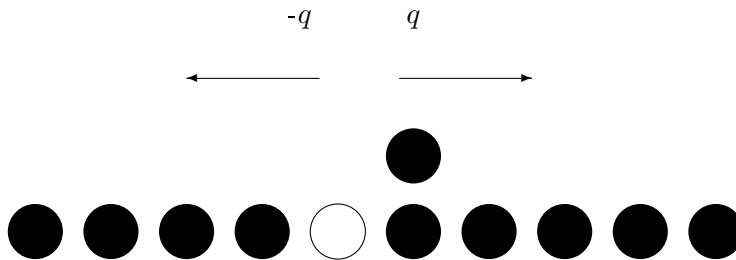
$$|\psi_{ini}\rangle \approx |\tilde{0}\rangle - \frac{2\sqrt{2}J}{U} \sum_q \sin(q) |\widetilde{K=0, q}\rangle. \quad (4.8)$$

Die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsverteilung ist verbunden mit dem Betragsquadrat des Überlapps $p(q) = |\langle \psi_{ini} | K=0, q \rangle|^2$. Insbesondere ist damit die Wahrscheinlichkeit, dass ein Doublon-Holon-Paar mit Impuls q entsteht, $p_q = 8(J/U)^2 \sin^2(q)$.

Für den Fall $p_q \ll 1$ ($J \ll U$) ist der Abstand $r = \rho^{-1} = 1/4(U/J)^2$ zwischen zwei Doublon-Holon-Paaren viel größer als die thermische Wellenlänge der Quasiteilchen. Unter diesen Umständen können die Anregungen quasiklassisch behandelt werden [8].

$$\rho = \frac{1}{L} \sum_q |\langle \psi_{ini} | K=0, q \rangle|^2 = \frac{1}{\pi} \sum_q \frac{\pi}{L} \frac{8J^2}{U^2} \sin^2(q) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \frac{8J^2}{U^2} \sin^2(q) = 4 \left(\frac{J}{U} \right)^2$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist von der Ordnung $(J/U)^2$ [1] und wird hier vernachlässigt. Zum Zeitpunkt $t=0$ wird mit der Impulsverteilung $p(q)$ ein Ensemble von Quasiteilchen erzeugt, deren Bewegung numerisch im Kontinuum simuliert wird. Neue Impulse nach Stoßereignissen zwischen Quasiteilchen werden mittels Energie- und Gitterimpulserhaltung berechnet.



5 Zeitentwicklung mit Energieerhaltung

Dieser Abschnitt ist angelehnt an [1] und behandelt die Zeitentwicklung des Zustandes $|\psi_{ini}(t)\rangle$ in einem abgeschlossenen System, in dem die Gesamtenergie, jedoch nicht der Impuls erhalten ist. Das System thermalisiert unter diesen Umständen durch Doublon-Holon-Stöße in einen Zustand mit $T = \infty$. Die Observable, die betrachtet wird, ist die Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ zwischen Teilchen i und Teilchen $i+n$.

5.1 Thermisches Gleichgewicht

Systeme im thermischen Gleichgewicht können durch nur wenige makroskopische zeitunabhängige Größen wie Volumen V , Temperatur T und chemischen Potential μ beschrieben werden. In einem lokalen thermischen Gleichgewicht können die thermodynamischen Größen zeitlich und räumlich variieren, jedoch sind in jedem Raumelement und zu jedem Zeitpunkt die thermodynamischen Relationen zwischen ihnen erfüllt [9].

Im statistischen Sinne ist ein Zustand im thermischen Gleichgewicht der Makrozustand, der mittels der meisten Mikrozustände realisiert werden kann und damit die wahrscheinlichste Konfiguration. Equilibrierung ist aus diesem Grund verbunden mit einem Anstieg der Entropie und somit ein irreversibler Prozess mit ausgezeichneter Richtung. Ein offenes System, im thermischen Gleichgewicht mit seiner Umgebung, weist bei endlicher Temperatur charakteristische Schwankungen in Größen wie Energie und Teilchenzahl auf [9]. Es bezeichnet im Folgenden r die diskreten Zustände eines Systems im thermischen Gleichgewicht. Die Schwankungen der Energie und Teilchenzahl sind gegeben durch die zweiten Ableitungen des Logarithmus der großkanonischen Zustandssumme Z .

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \mu^2} &= \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \ln \left(\sum_r e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \right) \\ &= \beta^2 \left[\frac{1}{Z} \sum_r N_r^2 e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} - \left(\frac{1}{Z} \sum_r N_r e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \right)^2 \right] \\ &= \beta^2 (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} &= \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \left(\sum_r e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \right) \\ &= \left[\frac{1}{Z} \sum_r (E_r - \mu N_r)^2 e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} - \left(\frac{1}{Z} \sum_r (E_r - \mu N_r) e^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \right)^2 \right] \\ &= \langle (E - \mu N)^2 \rangle - \underbrace{\langle E - \mu N \rangle^2}_{\tilde{E}} = \langle \tilde{E}^2 \rangle - \langle \tilde{E} \rangle^2 \end{aligned}$$

Für die Schwankungen der Energie und Teilchenzahl erhält man [9]:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{E}^2 \rangle - \langle \tilde{E} \rangle^2 &= \frac{\partial^2 \ln Z(T, V, \mu)}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} (\beta J(T, V, \mu)) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(J(T, V, \mu) - k_B T^2 \beta \underbrace{\frac{\partial J(T, V, \mu)}{\partial T}}_{-S} \right) \\
&= -\frac{\partial}{\partial \beta} (E - \mu N) = k_B T^2 \frac{\partial \tilde{E}(T, V, N)}{\partial T} = k_B T^2 \tilde{C}_V
\end{aligned} \tag{5.9}$$

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = (k_B T)^2 \frac{\partial^2 \ln Z(T, V, \mu)}{\partial \mu^2} = \frac{k_B T N^2}{V} \kappa_T. \tag{5.10}$$

mit der Wärmekapazität $\tilde{C}_V$, dem großkanonischen Potential J , der Entropie S , der isothermen Kompressibilität $\kappa_T = -(1/V)(\frac{\partial V(T, N, P)}{\partial P})$ und $\beta = 1/(k_B T)$. Weil die mittlere kinetische Energie in dem hier betrachteten System Null ist, relaxiert das System in einen Gleichgewichtszustand mit $T = \infty$. Abbildung 5.1 zeigt für diesen Fall die Impulsverteilung für verschiedene Zeitpunkte nach dem Quench im Verlauf der Thermalisierung. Zu Beginn entspricht die Verteilung der $\sin^2(q)$ -Anfangssverteilung, die im Laufe der Zeit abflacht, bis im thermischen Gleichgewicht jeder Impuls gleich wahrscheinlich ist. Wir können diesen Zustand thermisch nennen, da er sich durch die Boltzmann-Verteilung beschreiben lässt [10].

Generell erfolgt die Thermalisierung eines Vielteilchensystem nach einem Quanten Quench in drei Stufen, wobei sich die Wellenfunktion zunächst an den neuen Hamiltonoperator anpasst. Danach werden Quasiteilchen gebildet, die zu diesem Zeitpunkt jedoch noch nicht in Wechselwirkung miteinander stehen. In der zweiten Stufe wird durch mehrere Wechselwirkungsprozesse ein lokales Gleichgewicht erreicht, bis das System in der dritten und langwierigsten Phase in ein globales Gleichgewicht übergeht. Dieser Prozess ist hauptsächlich getrieben durch den diffusiven Transport von Erhaltungsgrößen [1]. Man würde daher erwarten, dass ein integrables System mit mindestens so vielen Erhaltungsgrößen wie Freiheitsgraden nicht thermalisiert, da zu viele Bedingungen an das System gestellt werden, die einen solchen Transport verhindern. Das hier betrachtete System ist aber aufgrund der unterschiedlichen Dispersionsrelation von Doublonen und Holonen nichtintegrabel.

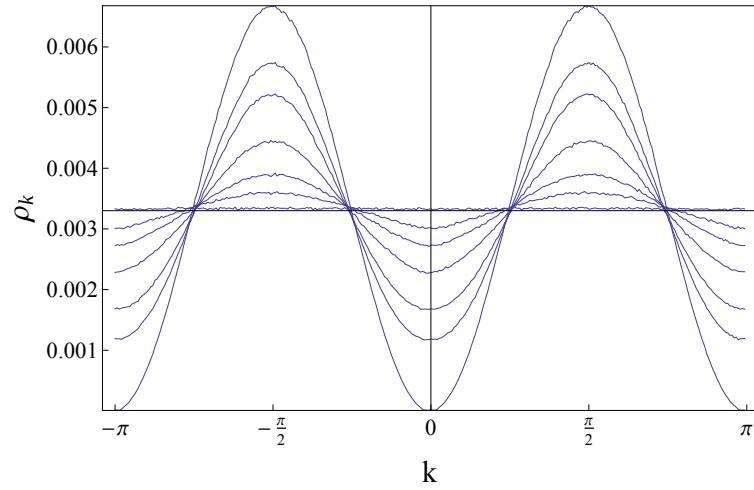


Abbildung 5.1: Impulsverteilung zu den Zeitpunkten $t=0, 1t_{sct}, 2t_{sct}, 3t_{sct}, 5t_{sct}, 10t_{sct}, 15t_{sct}$, mit t_{sct} der mittleren Zeit zwischen zwei Stößen pro Teilchen [1]

5.2 Diffusion

Der Energieerwartungswert ändert sich nach dem Quench nicht, dies gilt jedoch nicht für die Schwankungen der Energie. Um die neuen Fluktuationen nach dem Quench und anschließender Thermalisierung aufzubauen, wird Energie diffusiv mit Diffusionskonstante $D(\omega)$ transportiert. Da in den hydrodynamischen Gleichungen nur große Zeiten betrachtet werden, können wir $D(\omega) \approx D(\omega = 0) = D$ im Folgenden als konstant annehmen.

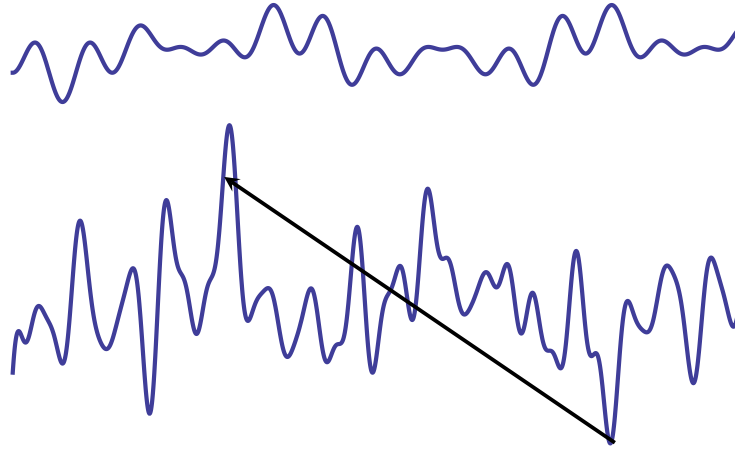


Abbildung 5.2: Energie muss transportiert werden, um die Fluktuationen nach dem Quench aufzubauen.

Es bezeichnet im Folgenden $e(\mathbf{r}, t)$ die Energiedichte und $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ die Energiestromdichte. Die zeitliche Änderung der Energie in einem d dimensional Volumen V ist gegeben durch den Fluss der Energie durch die begrenzende Fläche ∂V .

$$\frac{\partial}{\partial t} \oint_V e(\mathbf{r}, t) dV = - \oint_{\partial V} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{A} \quad (5.11)$$

In differentieller Form kann die Kontinuitätsgleichung geschrieben werden als

$$\frac{\partial}{\partial t} e(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (5.12)$$

In linearer Hydrodynamik ist die Energiestromdichte proportional zum Gradienten der Energiedichte $e(\mathbf{r}, t)$, unterliegt aber darüber hinaus thermischen Schwankungen $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$.

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D\nabla e(\mathbf{r}, t) - \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) + \dots \quad (5.13)$$

Theoretisch sind hier weitere Korrekturterme möglich, so könnte zum Beispiel der Gradient der Teilchendichte an die Energiestromdichte koppeln. Dies tritt hier jedoch wegen des Spezialfalls $T = \infty$ nicht auf [1]. Setzt man (5.13) in die Kontinuitätsgleichung ein, führt dies zur inhomogenen stochastischen Diffusionsgleichung.

$$\frac{\partial}{\partial t} e(\mathbf{r}, t) - D\nabla^2 e(\mathbf{r}, t) = \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \quad (5.14)$$

Gleichung (5.14) wird für $t > 0$ mit der Anfangsbedingung $e(\mathbf{r}, t = 0) = e_0(\mathbf{r})$ gelöst durch

$$e(\mathbf{r}, t) = \int d^d r_1 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) e_0(\mathbf{r}_1) + \int d^d r_1 \int_0^\infty dt_1 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}_1, t_1). \quad (5.15)$$

Dabei ist $G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1)$ die Greensche Funktion der Diffusionsgleichung mit der Eigenschaft

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D\nabla^2 \right) G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1). \quad (5.16)$$

Mit der Greenschen Funktion definiert wie in (5.16), ist (5.15) Lösung von (5.14) für $t > 0$.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} - D\nabla^2 \right) e(\mathbf{r}, t) &= \int d^d r_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t) e_0(\mathbf{r}_1) \\ &\quad + \int d^d r_1 \int_0^\infty dt_1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1) \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}_1, t_1) \\ &\stackrel{t \geq 0}{=} \nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

Zweimalige Fouriertransformation liefert die formale Lösung von Gleichung (5.16) für $t_1 = 0$, $\mathbf{r}_1 = \mathbf{0}$.

$$G_D(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 D - i\omega} \quad (5.17)$$

$$G_D(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}}{\mathbf{k}^2 D - i\omega} \quad (5.18)$$

Der Integrationsweg des ω -Integrals lässt sich für $t > 0$ in der unteren und für $t < 0$ in der oberen komplexen Ebene schließen. Da der Integrand nur bei $\omega = -iD\mathbf{k}^2$ einen Pol besitzt, ist $G_D(\mathbf{r}, t) = 0$ für $t < 0$.

$$G_D(\mathbf{k}, t) = e^{-\mathbf{k}^2 D t} \theta(t) \quad (5.19)$$

Die Greensche Funktion ist damit gegeben durch:

$$G_D(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{-\mathbf{k}^2 D t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} \theta(t) = \frac{1}{(4\pi D t)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{r}^2}{4Dt}\right) \theta(t) \quad (5.20)$$

$$\Rightarrow G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{1}{(4\pi D(t - t'))^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4D(t - t')}\right) \theta(t - t') \quad (5.21)$$

Im physikalischen Sinne beschreibt die Greensche Funktion $G_D(\mathbf{r}, t)$ die Propagation einer Größe, wie in diesem Fall der Energie, ausgehend von einer Punktquelle nach einem Einheitskraftstoß zum Zeitpunkt $t=0$.

5.3 Energiefluktuationen

Mit (5.15) kann die Zeitentwicklung der Energiefluktuationen $\langle e(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}', t) \rangle - \langle e(\mathbf{r}) e(\mathbf{r}') \rangle_{eq}$ berechnet werden. Nach Gleichung (5.9) gilt im Gleichgewichtszustand

$$\langle e(\mathbf{r}) e(\mathbf{r}') \rangle_{eq} = c_V k_B T^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5.22)$$

wobei berücksichtigt worden ist, dass die mittlere Energie im Gesamtsystem Null ist. Dies folgt aus der Kombination der $\sin^2(q)$ -Impulsverteilung und der Energie-Impuls-Beziehung $\epsilon(q) \sim \cos(q)$. Die Korrelation ist zwar nicht exakt lokal, lässt sich aufgrund der Tatsache, dass große Zeit- und Längenskalen betrachtet werden, durch eine Deltafunktion nähern. Da das thermische Rauschen $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ einen stochastischen Prozess darstellt, kann dessen Autokorrelation ebenfalls durch Deltafunktionen beschrieben werden.

$$\langle f_i(\mathbf{r}, t) f_j(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta_{ij} \underbrace{2k_B T^2 c_V}_{=:B} D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (5.23)$$

Der Vorfaktor ergibt sich dabei aus der Bedingung, dass im Gleichgewicht die thermodynamische Relation (5.22) gültig ist.

$$\begin{aligned} \langle e(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}', t) \rangle_{eq} &= \int \frac{d\Gamma}{(2\pi)^{2d+2}} \frac{-\mathbf{k}\mathbf{k}' \langle f(\mathbf{k}, \omega) f(\mathbf{k}', \omega') \rangle}{(D\mathbf{k}^2 - i\omega)(D\mathbf{k}'^2 - i\omega')} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t} \\ &= BD \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathbf{k}^2}{(D\mathbf{k}^2 + i\omega)(D\mathbf{k}^2 - i\omega)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\ &= \frac{B}{2} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \frac{B}{2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \stackrel{!}{=} k_B T^2 c_V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

Dabei wurde die verkürzte Schreibweise $d\Gamma = d^d k d^d k' d\omega d\omega'$, sowie die Fouriertransformierte von (5.23) verwendet.

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{k}, \omega) f(\mathbf{k}', \omega') \rangle &= \int d^d r \int d^d r' \int dt \int dt' \langle f(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}', t') \rangle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} e^{i\omega t} e^{i\omega' t'} \\ &= B \int d^d r \int d^d r' \int dt \int dt' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} e^{i\omega t} e^{i\omega' t'} \\ &= B \int d^d r \int dt e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\mathbf{r}} e^{i(\omega+\omega')t} = (2\pi)^{d+1} B \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \delta(\omega + \omega') \end{aligned}$$

Für die Energie-Energie-Korrelation erhält man mit (5.15)

$$\begin{aligned} \langle e(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}', t) \rangle &= \int d^d r_1 \int d^d r_2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2, t) \langle e_0(\mathbf{r}_1) e_0(\mathbf{r}_2) \rangle \\ &+ \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \int d^d r_1 \int d^d r_2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2, t - t_2) \\ &\quad \langle \nabla_{\mathbf{r}_1} \mathbf{f}(\mathbf{r}_1, t_1) \nabla_{\mathbf{r}_2} \mathbf{f}(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Nach zweimaliger partieller Integration und mit (5.23) und (5.16), lässt sich der zweite Term in (5.24) umschreiben.

$$\begin{aligned} &B \int_0^\infty dt_1 \int d^d r_1 \nabla_{\mathbf{r}_1} G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) \nabla_{\mathbf{r}_1} G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t - t_1) \\ &= -\frac{B}{2} \int_0^\infty dt_1 \int d^d r_1 \left[G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) (\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t - t_1)) \right. \\ &\quad \left. + (\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1)) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t - t_1) \right] \\ &\stackrel{(5.16)}{=} \frac{B}{2D} \int_0^\infty dt_1 \int d^d r_1 \left[\frac{\partial}{\partial t_1} (G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t - t_1)) \right. \\ &\quad + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t - t_1) \\ &\quad \left. + \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1) G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t - t_1) \right] \\ &= k_B T^2 c_V \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - k_B T^2 c_V \int d^d r_1 \int d^d r_2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2, t) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= \langle e(\mathbf{r}) e(\mathbf{r}') \rangle_{eq} - \int d^d r_1 \int d^d r_2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2, t) \langle e(\mathbf{r}_1) e(\mathbf{r}_2) \rangle_{eq} \end{aligned}$$

Die zeitliche Entwicklung der Energiefluktuationen ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} &\langle e(\mathbf{r}, t) e(\mathbf{r}', t) \rangle - \langle e(\mathbf{r}) e(\mathbf{r}') \rangle_{eq} = \\ &\int d^d r_1 \int d^d r_2 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2, t) (\langle e_0(\mathbf{r}_1) e_0(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle e(\mathbf{r}_1) e(\mathbf{r}_2) \rangle_{eq}). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Für $t=0$ entspricht der Ausdruck $\langle e_0(\mathbf{r}) e_0(\mathbf{r}') \rangle - \langle e(\mathbf{r}) e(\mathbf{r}') \rangle_{eq}$ und für $t \rightarrow \infty$ geht die Energie-Energie-Korrelation in den Gleichgewichtswert über und somit die Differenz gegen Null. Unter der Annahme von kurzreichweitigen Korrelationen der Energiedichte zum Zeitpunkt $t=0$

$$\langle e_0(\mathbf{r})e_0(\mathbf{r}') \rangle = C\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (5.26)$$

und mit der Beziehung $\int d^d r_1 G_D(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1, t) G_D(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1, t) = G_{2D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t)$ erhält man für die zeitliche Entwicklung der Energiefluktuationen

$$\begin{aligned} \langle e(\mathbf{r}, t)e(\mathbf{r}', t) \rangle - \langle e(\mathbf{r})e(\mathbf{r}') \rangle_{eq} &= (C - k_B c_V T^2) \frac{1}{(8\pi Dt)^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{8Dt}\right) \\ &\sim \frac{1}{t^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{8Dt}\right). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Bei konstanter Gesamtenergie wird ein globales thermisches Gleichgewicht nur algebraisch erreicht. Im betrachteten eindimensionalen Fall ist die Zeitentwicklung für $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \ll Dt$ proportional zu $1/\sqrt{t}$. Fits der Form $c x^{-d}$ liefern jedoch einen Exponenten $d \approx 2/3$. Dies zeigt, dass weitere Terme mit großen Vorfaktor in (5.13) auftreten, die nicht mehr vernachlässigt werden dürfen. In [1] wurde argumentiert, dass Korrekturterme proportional zu $t^{-3/4}$ berücksichtigt werden müssen und die Daten somit durch Fits der Form $at^{-1/2} + bt^{-3/4} = t^{-1/2}(a + bt^{-1/4})$ beschrieben werden können. In Abbildung 5.3 ist die Relaxation der Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ dargestellt, wobei die Zeit auf die mittlere Zeit zwischen zwei Streuungen pro Teilchen normiert ist.

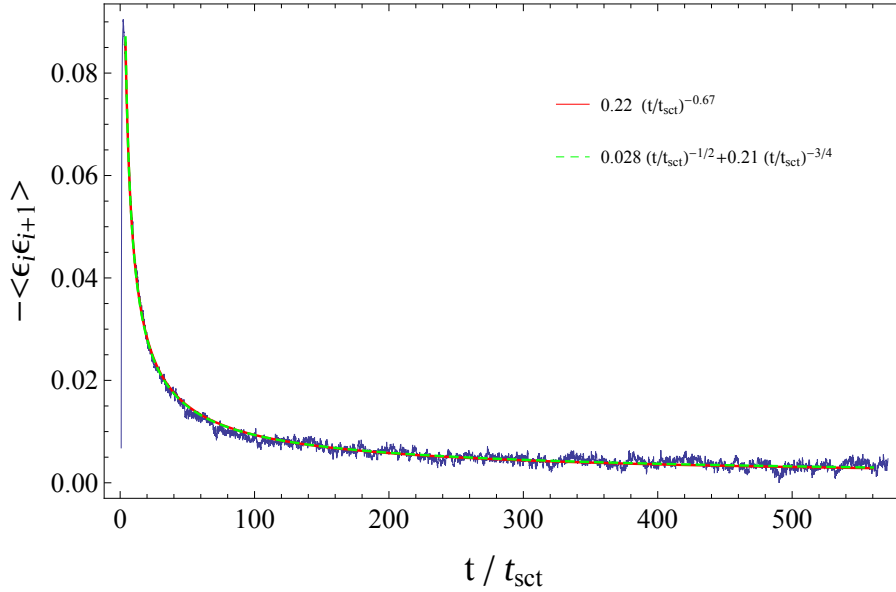


Abbildung 5.3: Energiekorrelation nächster Nachbarn bei konstanter Gesamtenergie [1]

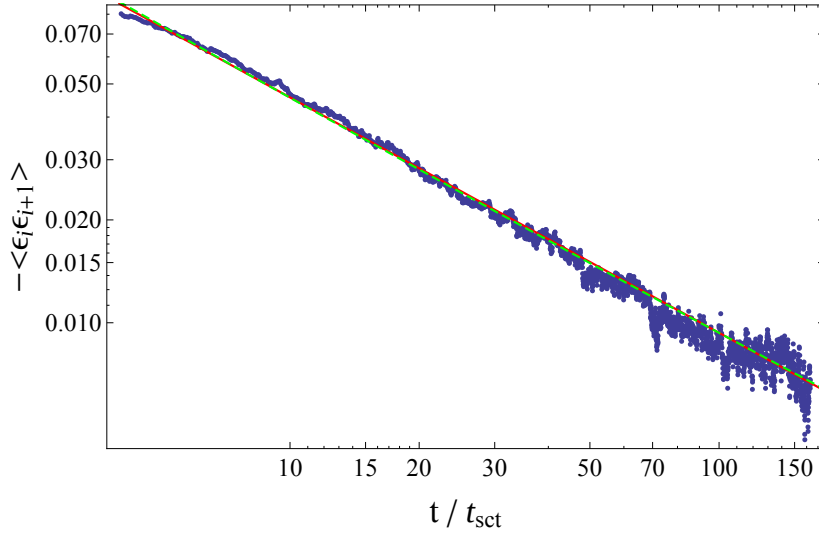


Abbildung 5.4: doppelt logarithmische Darstellung der Energiekorrelation nächster Nachbarn bei konstanter Gesamtenergie [1]

5.4 Skalentransformation

Um zu überprüfen, welche Korrekturterme in (5.13) zu berücksichtigen sind, können wir deren Relevanz durch eine Skalenanalyse abschätzen. Gesucht ist eine Transformation, unter der (5.14) invariant ist. Die linke Seite von (5.14) impliziert den Ansatz $\mathbf{r} = \lambda \tilde{\mathbf{r}}, t = \lambda^2 \tilde{t}$ ($\lambda \gg 1$). Für das thermische Rauschen $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ ergibt sich dann

$$\langle f(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}', t') \rangle \sim \delta(\lambda(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}')) \delta(\lambda^2(\tilde{t} - \tilde{t}')) = \frac{1}{\lambda^{d+2}} \delta(\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}') \delta(\tilde{t} - \tilde{t}')$$

$$\Rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \lambda^{-\frac{d+2}{2}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}).$$

Eingesetzt in die Diffusionsgleichung, liefert dies eine Bedingung an die Transformation der Energiedichte.

$$\frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} e(\mathbf{r}, t) - D \frac{1}{\lambda^2} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}^2 e(\mathbf{r}, t) = \lambda^{-\frac{d}{2}-2} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})$$

$$\Rightarrow e(\mathbf{r}, t) = \lambda^{-\frac{d}{2}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}).$$

Gleichung (5.14) ist invariant unter der Transformation

$$\mathbf{r} = \lambda \tilde{\mathbf{r}}, \quad t = \lambda^2 \tilde{t}, \quad e(\mathbf{r}, t) = \lambda^{-\frac{d}{2}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \lambda^{-\frac{d+2}{2}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \quad (5.28)$$

$$\frac{1}{\lambda^{d/2+2}} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) - D \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}^2 e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) - \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} \mathbf{f}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right) = 0$$

Mögliche nichtlineare Korrekturterme sind zum Beispiel gegeben durch $\alpha \nabla(e(\mathbf{r}, t) \nabla e(\mathbf{r}, t))$ oder $\beta \nabla(n(\mathbf{r}, t) \nabla e(\mathbf{r}, t))$ mit der Teilchendichte $n(\mathbf{r}, t)$.

$$\nabla_{\mathbf{r}}(e(\mathbf{r}, t) \nabla_{\mathbf{r}} e(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{\lambda^{d+2}} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}(e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})) = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}+2}} \left(\frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}}} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}(e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})) \right)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}}(n(\mathbf{r}, t) \nabla_{\mathbf{r}} e(\mathbf{r}, t)) = \frac{1}{\lambda^{d+2}} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}(n(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})) = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}+2}} \left(\frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}}} \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}}(e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} n(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})) \right)$$

$$\Rightarrow \tilde{\alpha} = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}}} \alpha, \quad \tilde{\beta} = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}}} \beta$$

Beide Terme werden mit $\lambda^{-d/2}$ unterdrückt und sind daher in allen Dimensionen irrelevant. Treten sie jedoch mit einem großen Vorfaktor auf, sind sie für kurze Zeiten nicht vernachlässigbar. Setzt man in einer Dimension $\lambda = 1/\sqrt{t}$, stellen beide Terme theoretische Kandidaten für die Abweichung vom $1/\sqrt{t}$ Verlauf dar. Der α Term tritt jedoch im betrachteten System bei $T = \infty$ nicht auf, da er im Gegensatz zur linken Seite von (5.14) invariant ist unter der Transformation $e \rightarrow -e$ [1].

6 Numerik

Im Folgenden wird auf die Eigenschaften und den Aufbau des verwendeten Programms eingegangen, das grundlegend drei Hauptaufgaben besitzt: Initialisierung der Anfangskonfiguration gemäß der $\sin^2(q)$ -Impulsverteilung, Berechnung der Stoßereignisse bei Energie- und Gitterimpulserhaltung und Änderung der Energie und gegebenenfalls der Teilchenart eines Quasiteilchens mit einer festgelegten Rate τ^{-1} . Zu Beginn werden die t/τ Zeitpunkte, an denen ein Quasiteilchen ausgetauscht wird, zufällig bestimmt und sortiert, wobei t die eingestellte Gesamtzeit beschreibt. Der im Programm verwendete Zufallszahlengenerator ist der mit der Systemzeit initialisierte Mersenne Twister MT19937 mit einer Periode von $2^{19937} - 1$. Die Verwaltung der Daten erfolgt mittels zwei sortierter Listen, von denen die eine alle relevanten Informationen der Quasiteilchen enthält und in der anderen die Daten über alle bevorstehenden Stoßereignisse gespeichert sind. Die Teilchenliste ist sortiert nach der Position der Quasiteilchen und enthält die Informationen über die Teilchenart, den Ort und Zeitpunkt des letzten Stoßes, die Zeitpunkte für den nächsten Stoß mit dem linken und rechten Nachbarn, sowie Impuls und Geschwindigkeit des Quasiteilchens. Mit diesen Daten kann die aktuelle Position des Quasiteilchens zu jedem Zeitpunkt bestimmt werden. Die Sortierung dieser Liste ändert sich nicht, da die Möglichkeit des Tunnelns vernachlässigt wird und feste Randbedingungen verwendet werden. Die zweite Liste ist als Binärbaum realisiert und enthält die Information über den Zeitpunkt des nächsten Stoßes, nach denen die Liste sortiert ist, sowie über die beteiligten Teilchen.

Um die Anfangskonfiguration zu initialisieren, wird die Anzahl der Gitterpunkte L durchlaufen und mit einer Wahrscheinlichkeit von

$$P_{dh} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \frac{8J^2}{U^2} \sin^2(q) = 4 \left(\frac{J}{U} \right)^2$$

ein Doublon-Holon-Paar erzeugt, wobei J/U als globaler Parameter festgelegt ist. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Holon links beziehungsweise rechts vom Doublon entsteht, ist gleich gewählt.

Der Impuls des erzeugten Paares ist dabei verteilt gemäß $p_q \sim \sin^2(q)$. Um aus gleichverteilten Zufallszahlen im Bereich $[0,1]$, Zufallszahlen q im Intervall $[0,\pi]$ zu generieren, die der Verteilung $p(q) = \sin^2(q)$ unterliegen, wird numerisch der Wert der Umkehrfunktion $f^{-1} : [0, 1] \rightarrow [0, \pi]$ von

$$f : [0, \pi] \rightarrow [0, 1]$$

$$f(k) \mapsto \frac{2}{\pi} \int_0^k dq \sin^2(q)$$

für eine Menge von 10.000 Werten im Intervall $[0,1]$ berechnet. Die nach $p(q)$ verteilten Impulse werden dann im Programmverlauf durch lineare Interpolation aus den gleichverteilten Zufallszahlen zwischen Null und Eins über diese Zuordnung bestimmt. Das Vorzeichen des Impulses wird mit einer Wahrscheinlichkeit von $1/2$ positiv beziehungsweise negativ gewählt. Der Hauptanteil der Laufzeit des Programms entfällt auf die Berechnung der Stöße, die mit der Teilchenanzahl N von der Ordnung $\mathcal{O}(\log(N))$ ist. Das aktuelle Stoßereignis ist gegeben

durch das erste Element in der Stoßliste, die nach Stoßzeitpunkten sortiert ist. Über dieses besteht auch der Zugriff auf die am Stoß beteiligten Teilchen.

Bei den Stößen sind zwei Fälle zu unterscheiden: Einerseits Stöße zwischen Holonen und Holonen beziehungsweise Doublonen und Doublonen, bei denen nur die Impulse gegenseitig ausgetauscht werden und andererseits Doublon-Holon-Stößen, bei denen sich die Impulse im Allgemeinen ändern und über Impuls- und Energieerhaltung berechnet werden müssen.

$$\begin{aligned} q_h + q_d &= q'_h + q'_d + 2\pi n \\ 2 \cos(q_h) + 4 \cos(q_d) &= 2 \cos(q'_h) + 4 \cos(q'_d) \end{aligned}$$

Die neuen Impulse sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned} q'_h &= 2 \arctan \left[\frac{-\sin\left(\frac{q_h}{2}\right) + 2 \sin\left(\frac{q_h}{2} + q_d\right)}{\cos\left(\frac{q_h}{2}\right) + 2 \cos\left(\frac{q_h}{2} + q_d\right)} \right] \\ q'_d &= q_h + q_d - q'_h + 2\pi n. \end{aligned}$$

Nach Berechnung der neuen Impulse muss das erste Element der Stoßliste, sowie die maximal zwei weiteren Einträge der Stoßliste, die die Stoßereignisse der beiden Stoßpartner mit ihren jeweiligen anderen Nachbarn beschreibt, gelöscht werden. Inwieweit diese beiden weiteren Elemente, die sich an beliebiger Position in der Stoßliste befinden können, überhaupt existieren, kann überprüft werden, da für jedes Quasiteilchen in der Teilchenliste der Zeitpunkt des nächsten Stoßes mit seinem linken (t_{left}) und rechten Nachbarn (t_{right}) gespeichert ist. Existiert kein solches Stoßereignis, ist dieser Parameter negativ gesetzt. Durch die Wahl der Streuliste als Binärbaum ist grundsätzlich gewährleistet in $\mathcal{O}(\log(N))$ nach Einträgen zu suchen, jedoch besteht das Problem, dass die Liste nach Gleitkommazahlen sortiert ist, die bei großen Quasiteilchenzahlen beliebig nahe beieinander liegen können. Da Gleitkommazahlen nur mit einer gewissen Ungenauigkeit berechnet und somit auch verglichen werden können, besteht die Gefahr existierende Listenelemente nicht zu finden, beziehungsweise auf falsche Elemente zuzugreifen. Um diesem Problem vorzubeugen wird nicht nach dem Stoßereignis mit Stoßzeitpunkt t , sondern nach Stoßereignissen in einer δ -Umgebung $(t - \delta, t + \delta)$ um t gesucht. Da in jedem Listenelement der Streuliste auch die Information über die am Stoß beteiligten Quasiteilchen gespeichert ist, kann das gesuchte Stoßereignis exakt aus dieser Menge bestimmt werden. Abschließend werden die neuen Stoßereignisse der am Stoß beteiligten Quasiteilchen mit ihren jeweiligen anderen Nachbarn berechnet und in die Stoßliste einsortiert.

An den zu Beginn bestimmten Zeitpunkten wird der Impuls eines zufällig gewählten Teilchens durch einen neuen Impuls q ersetzt, der erneut der $\sin^2(q)$ -Verteilung unterliegt, sowie die Teilchenart mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.5 geändert. Anschließend werden die alten Stoßereignisse dieses Teilchens gelöscht, sowie die beiden neuen Stoßereignisse mit seinen Nachbarn berechnet und in die Stoßliste einsortiert. Das Programm ist bei der Berechnung der Stöße und bei den Fluktuationen von der Ordnung $\mathcal{O}(\log(N))$, dass heißt, insgesamt ist die Ordnung des Programms für einen festen Zeitraum $\mathcal{O}(N \log(N))$. Für die Daten in dieser Arbeit wurden 100 Ensembles mit jeweils $3 \cdot 10^5$ Quasiteilchen simuliert.

7 Zeitentwicklung ohne Energieerhaltung

Im Gegensatz zu Abschnitt 5 wird nun die Zeitentwicklung des Zustandes $|\psi_{ini}(t)\rangle$ in einem offenen System ohne Energieerhaltung diskutiert. Dazu wird mit einer mittleren Rate τ^{-1} der Impuls und mit einer Wahrscheinlichkeit von 0.5 die Teilchenart eines Quasiteilchens geändert. Für die Impulsverteilung des hinzugefügten Quasiteilchens wird die $\sin^2(q)$ -Verteilung des Ausgangszustandes verwendet. Dies ist nicht physikalisch erforderlich, sondern eine beliebige Wahl. Dieser Fluktuationsprozess stellt zwar keinen Energietransport dar, ist jedoch eine zusätzliche Möglichkeit die Energie lokal zu ändern. Die Erwartung ist daher, dass die Relaxation nun beschleunigt erfolgt. Abbildung 7.5 zeigt die Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ zwischen Teilchen i und Teilchen $i+1$ für verschiedene Fluktuationsraten, wobei der Parameter $\alpha = N_{sct}/N_{fluc}$ die Gesamtzahl der Stöße im Zeitraum τ angibt. Es zeigt sich, dass das System nun nicht mehr thermalisiert, sondern in einen stationären Zustand mit konstanter Energie-Energie-Korrelation übergeht. In diesem Fall werden Korrelationen durch den Fluktuationsprozess mit der gleichen Geschwindigkeit aufgebaut, wie durch Doublon-Holon-Stöße abgebaut. Weiter weisen die Kurven für $\alpha \lesssim 600$ nach dem Abfall im Bereich der ersten 50 Stoßzeiten einen erneuten Anstieg auf, bevor sie ihren stationären Wert erreichen. Dies ist in Abbildung 7.6 für $\alpha = 132$ dargestellt. Der Abfall der Energiekorrelation nächster Nachbarn vor diesem Anstieg verläuft jedoch exponentiell, wie Abbildung 7.7 zu entnehmen ist.

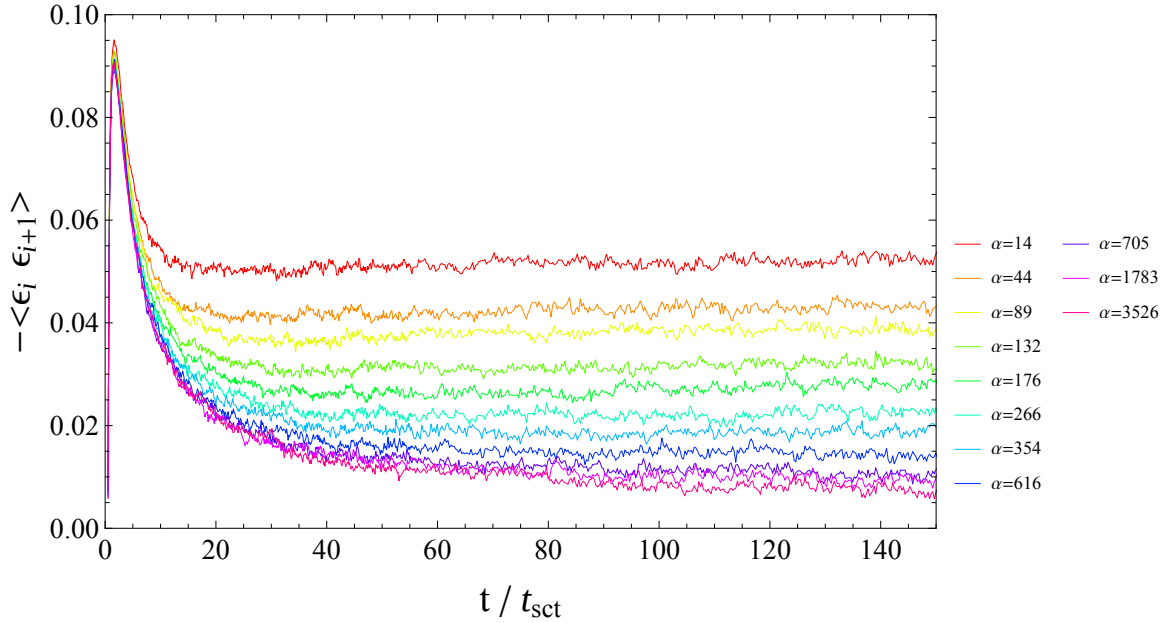
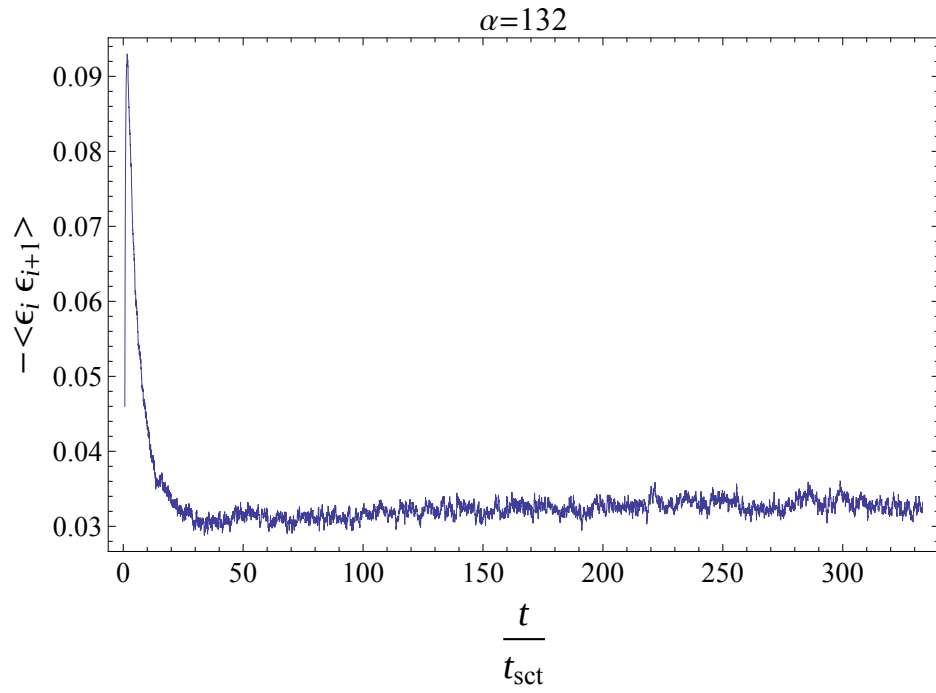
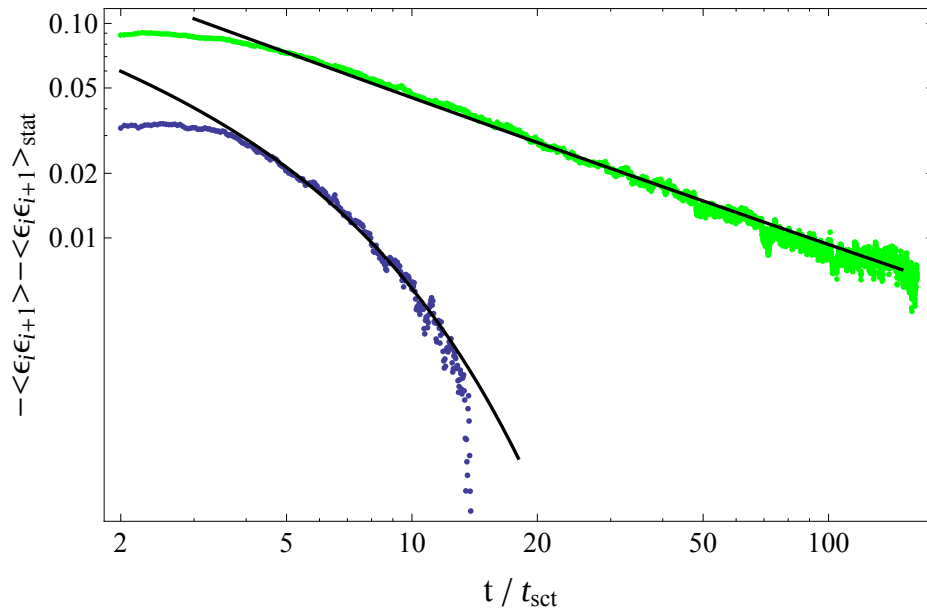


Abbildung 7.5: Energiekorrelation nächster Nachbarn für α -Werte zwischen 14 und 3526

Abbildung 7.6: Energiekorrelation nächster Nachbarn für $\alpha = 132$ Abbildung 7.7: doppelt logarithmische Darstellung der Energiekorrelation nächster Nachbarn für $\alpha = 27$ und $\alpha = \infty$, wobei der stationäre Wert der Energiekorrelation subtrahiert worden ist

7.1 Diffusionsgleichung

Ein möglicher Ansatz, um die Situation mit Teilchenfluktuation zu beschreiben, besteht darin, Gleichung (5.14) geeignet zu erweitern. Da die Dimension der Gleichung Energiedichte/Zeit ist und die einzige den Prozess auszeichnende Zeit τ ist, lässt sich Gleichung (5.14) wie folgt ergänzen

$$\frac{\partial}{\partial t} e(r, t) - D \nabla^2 e(r, t) = -\frac{e(r, t)}{\tau} + \nabla f(r, t) + g(r, t). \quad (7.29)$$

Dabei bezeichnet $g(r, t)$ das auf die Fluktuation zurückgehende zusätzliche Rauschen. Da die Fluktuationen einen zufälligen Prozess darstellen, kann die Korrelation $\langle g(r, t)g(r', t') \rangle$ räumlich und zeitlich durch Deltafunktionen beschrieben werden.

$$\langle g(r, t)g(r', t') \rangle = \frac{A}{\tau} \delta(r - r') \delta(t - t'). \quad (7.30)$$

Wendet man die Skalentransformation (5.28) auf den neuen Term $e(r, t)/\tau$ an, zeigt sich, dass dieser in jeder Dimension relevant ist und auch das Skalenverhalten ändert.

$$\frac{e(\mathbf{r}, t)}{\tau} = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}}} \frac{e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\tau} = \frac{1}{\lambda^{\frac{d}{2}+2}} \left(\lambda^2 \frac{e(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\tau} \right), \quad \frac{1}{\tilde{\tau}} = \lambda^2 \frac{1}{\tau} \quad (7.31)$$

Gleichung (7.29) kann wie Gleichung (5.14) durch Fouriertransformation gelöst werden. Dies geschieht im Folgenden für den hier betrachteten eindimensionalen Fall. Die Greensche Funktion $\tilde{G}_D(r - r', t - t')$ erfüllt die Gleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{\tau} \right) \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) = \delta(r - r_1) \delta(t - t_1). \quad (7.32)$$

Für $t_1 = 0$ und $r_1 = 0$ ergibt sich

$$\tilde{G}_D(k, \omega) = \frac{1}{k^2 D - i\omega + \frac{1}{\tau}} \quad (7.33)$$

$$\tilde{G}_D(r, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{k^2 D - i\omega + \frac{1}{\tau}}.$$

Wir erhalten für die Greensche Funktion $\tilde{G}_D(r, t)$

$$\tilde{G}_D(r, t) = e^{-t/\tau} \int \frac{dk}{2\pi} e^{-k^2 D t + ikr} \theta(t) = e^{-t/\tau} G_D(r, t) \quad (7.34)$$

$$\Rightarrow \quad \tilde{G}_D(r - r', t - t') = \frac{e^{-(t-t')/\tau}}{\sqrt{4\pi D(t-t')}} \exp\left(-\frac{(r-r')^2}{4D(t-t')}\right) \theta(t-t') \quad (7.35)$$

Bis auf den zusätzlichen Faktor $e^{-t/\tau}$ entspricht dies der Greenschen Funktion $G_D(r, t)$ aus (5.20). Die Lösung von (7.29) ergibt sich durch Faltung von (7.35) mit den Anfangsbedingungen und der Inhomogenität für $t > 0$ zu

$$e(r, t) = \int dr_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t) e_0(r) + \int dr_1 \int_0^\infty dt_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) (\nabla f(r_1, t_1) + g(r_1, t_1)). \quad (7.36)$$

Im Grenzfall $\tau \rightarrow \infty$, $A \rightarrow 0$ geht Gleichung (7.36) in (5.15) über.

7.2 Analytische Lösung

Die Energie-Energie-Korrelation kann mittels (7.36), unter Verwendung von (5.23), (5.26) und (7.30) für $t\sqrt{\frac{D}{\tau}} > |r - r'| > 0$ näherungsweise berechnet werden (Anhang B). Als Ergebnis erhalten wir

$$\langle e(r, t) e(r', t') \rangle \approx \underbrace{\left(\frac{A - B}{4} \right) \frac{\exp\left(-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D\tau}}\right)}{\sqrt{D\tau}}}_{\text{Asymptotik}} - \underbrace{\left(\frac{A - B}{4\sqrt{2\pi}} \right) \frac{e^{-\frac{2t}{\tau}}}{\sqrt{Dt}} - \left(\frac{\frac{B}{2} - C}{2\sqrt{2\pi}} \right) \frac{e^{-\frac{2t}{\tau}} \exp\left(-\frac{(r-r')^2}{8Dt}\right)}{\sqrt{Dt}}}_{\text{Zeitentwicklung}}. \quad (7.37)$$

Gleichung (7.37) reproduziert nicht Gleichung (5.25) im Limes $\tau \rightarrow \infty$, $A \rightarrow 0$, da die Entwicklung, die in (7.37) eingeht, nur für endliche τ gültig ist. Der erste Term beschreibt das asymptotische Verhalten der Energiefluktuation, wobei die Abhängigkeit von τ gegeben ist durch $\frac{1}{\sqrt{\tau}} \exp(-1/\sqrt{\tau})$. Dies erklärt den betragsmäßigen Anstieg des asymptotischen Wertes in Abbildung 7.5 bei zunehmender Fluktuationsrate τ^{-1} .

Der zweite Term gibt den zeitlichen Verlauf der Energie-Energie-Korrelation wieder und ist von der Form $\frac{1}{\sqrt{t}} \exp(-2t/\tau)(a + b \exp(-(r - r')^2/8Dt))$. In Abhängigkeit von den Vorfaktoren a und b kann dieser Term ein Extremum aufweisen und könnte somit für das in Abbildung 7.5 beobachtete erneute Ansteigen der Energie-Energie-Korrelation verantwortlich sein. Betrachtet man anstelle der Korrelation nächster Nachbarn $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ den Erwartungswert $\langle \epsilon_i^2 \rangle$, sollte dieser Effekt nicht mehr auftreten, da der exponentielle Anteil $\exp\left(-\frac{(r-r')^2}{8Dt}\right)$ verschwindet.

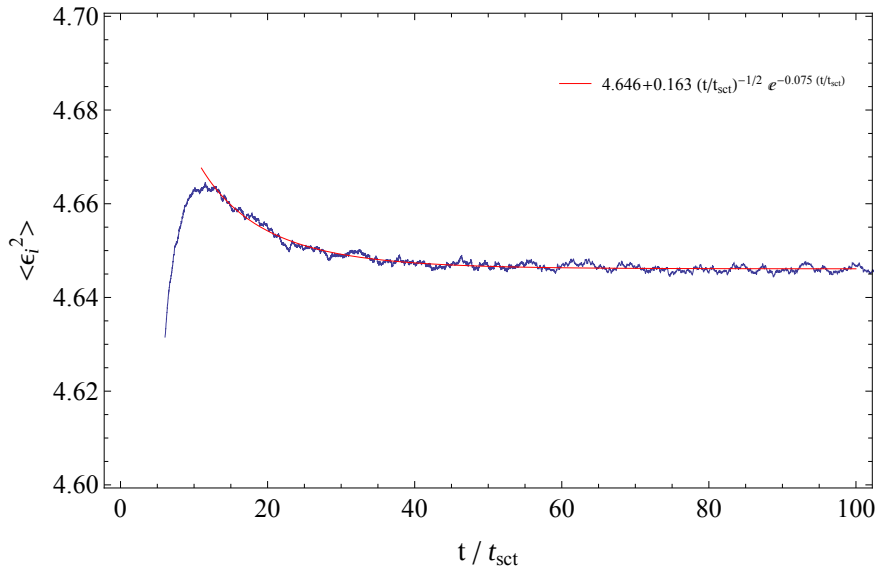


Abbildung 7.8: Erwartungswert $\langle \epsilon_i^2 \rangle$ für $\alpha = 14$

Für den Erwartungswert $\langle \epsilon_i^2 \rangle$ erhalten wir für zum Zeitpunkt $t=0$

$$\langle \epsilon_i^2 \rangle = \frac{J^2}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq \sin^2(q) ((2 \cos(q))^2 + (4 \cos(q))^2) = \frac{5}{2} J^2.$$

Würde das System thermalisieren, wäre der Erwartungswert im Limes $t \rightarrow \infty$ bei gleichverteilten Impulsen gegeben durch $\langle \epsilon_i^2 \rangle = 5J^2$. Da aufgrund der Teilchenfluktuation jedoch immer noch ein Anteil der $\sin^2$ -Impulsverteilung vorhanden ist, liegt der Grenzwert in Abbildung 7.8 unterhalb dieses Wertes ($J = 1$). Die mit dem hier gewählten Protokoll der Energiefluktuation erreichten stationären Zustände sind keine thermischen Zustände, weil die mittlere kinetische Energie zwar Null ist, jedoch nicht alle Impulse gleich wahrscheinlich sind. Das System kann daher nicht durch das kanonische Ensemble beschrieben werden.

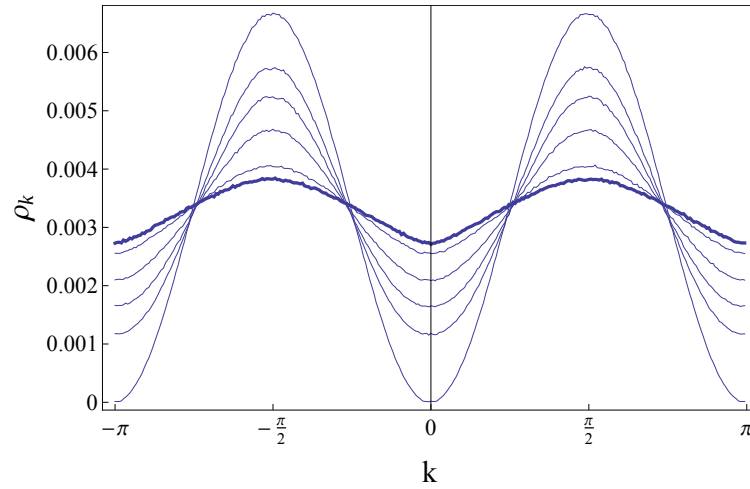
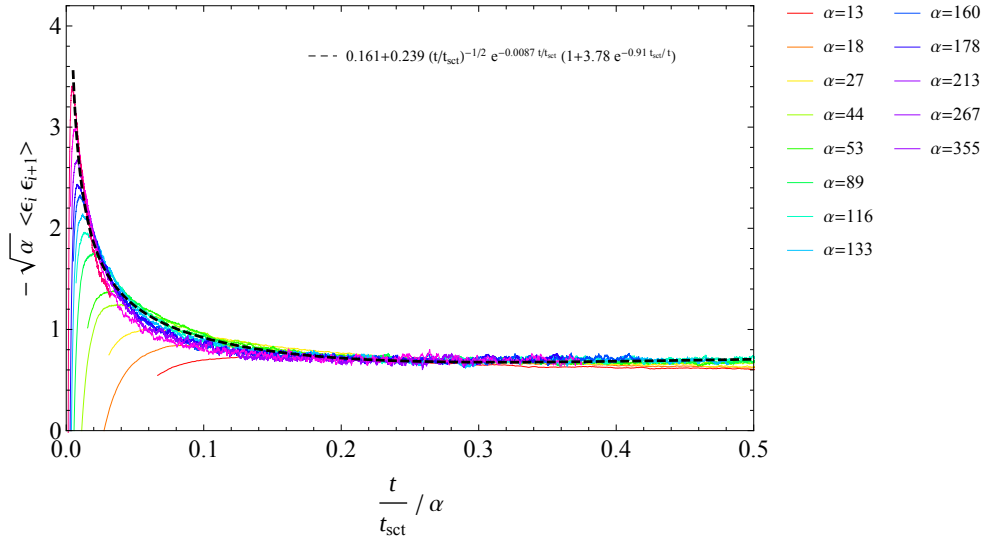


Abbildung 7.9: Impulsverteilung für $\alpha = 14$ und $t = 0, 1, 2, 3, 5 t_{sct}$, sowie die stationäre Verteilung

Funktionen der Form (7.37) sind schwer zu fitten und erlauben somit insbesondere keine exakte Bestimmung des Parameters τ . Fügt man jedoch die neuen Quasiteilchen mit gleichverteilten Impulsen in das System ein, zeigt sich, dass die Energiekorrelation nächster Nachbarn für große Zeiten gegen Null geht und τ bestimmt werden kann. Dies wird in Abschnitt 8 kurz angesprochen.

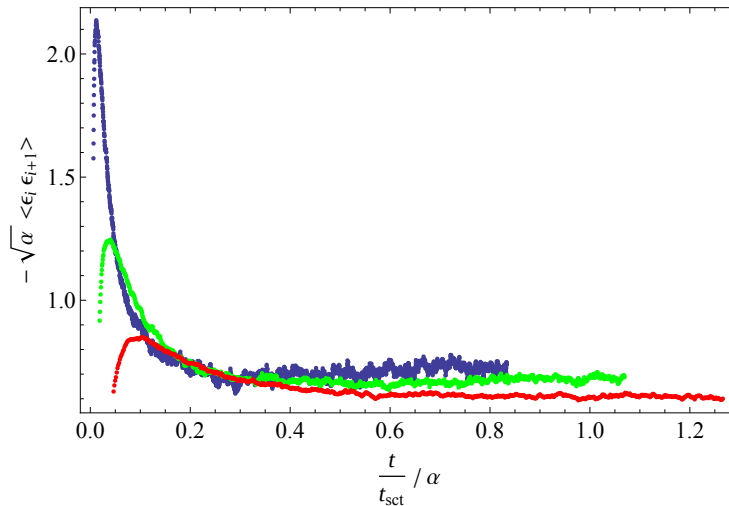
Ein weiteres Problem besteht darin, dass die Streuzeit t_{sct} , die man aus der Division der Gesamtzeit t und der Anzahl der Stöße pro Teilchen N_{sct}/N erhält, von der Fluktuationsrate τ^{-1} abzuhängen scheint und mit größeren Werten von τ^{-1} ansteigt. Dies ist ein Resultat der Tatsache, dass bei ungefähr gleichen Gesamtlaufzeiten die Zeit, in der das System nicht stationär ist, für kleinere Fluktuationsraten τ^{-1} größer ist. Die Anzahl der Streuungen in diesem Zeitbereich geht somit mit einer größeren Gewichtung in die Berechnung der Streuzeit ein. Wird der Bereich auf die Zeiträume eingegrenzt, in denen das System stationär ist, erhält man eine Streuzeit, die unabhängig von τ ist. Diese Zeit wird in allen Plots und zur Berechnung von $\alpha = N\tau/t_{sct}$ als Streuzeit verwendet. Der Parameter α ist somit proportional zu τ und kann anstelle von τ als Skalierungsparameter verwendet werden.

Abbildung 7.10: Skalenplot mit Fit-Funktion für $\alpha = 116$

Nach der analytischen Lösung (7.37) ist der zeitliche Verlauf dominiert durch $\frac{1}{\sqrt{t}}e^{-t/\tau}$. Skaliert man die Zeit mit $\frac{1}{\alpha}$ und die Energie-Energie-Korrelation mit $\sqrt{\alpha}$, sollte der Verlauf daher unabhängig von α werden. In Abbildung (7.10) ist diese Skalentransformation für α -Werte zwischen 13 und 355 dargestellt.

Für kleine Zeiten dominiert der algebraische Term $1/\sqrt{t}$ den Verlauf, der auch die Relaxation bei konstanter Energie beschreibt. Für große Zeiten ist der Abfall durch den exponentiellen Anteil $e^{-t/\tau}$ bestimmt. Im Skalenplot könnte der Übergang dieser beiden Regime im Bereich von 0.1 liegen.

Das Minimum der Energie-Energie-Korrelation skaliert dabei aber nicht. Dies kann Abbildung 7.11 entnommen werden, in der der Verlauf für $\alpha = 18, 44$ und 133 dargestellt ist. Für $\alpha = 133$ liegt das Minimum im Bereich von 0.3, für $\alpha = 44$ im Bereich von 0.6 und für $\alpha = 18$ bei ungefähr 1.0.

Abbildung 7.11: Verlauf für $\alpha = 133$ (blau), $\alpha = 44$ (grün) und $\alpha = 18$ (rot)

7.3 Asymptotische Verhalten

Bei genügend großer Fluktuationsrate thermalisiert das System nicht mehr, sondern strebt in einen stationären Zustand mit zeitlich konstanter Energie-Energie-Korrelation. Dieser stationäre Wert steigt betragsmäßig mit abnehmenden Werten von α und geht für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen Null. Um das asymptotische Verhalten genauer zu untersuchen, berechnen wir zunächst die stationäre Lösung von $\langle e(r, t) e(r', t') \rangle$ für $t=t'$. Für die Korrelationen der Fluktuationen $g(r, t)$ und $f(r, t)$ werden die Ausdrücke aus (7.30) und (5.23) verwendet. Weiterhin sind f und g als Produkte unabhängiger Prozesse unkorreliert und somit gilt $\langle f(r, t) g(r', t') \rangle = 0$. Durch Fouriertransformation erhalten wir die Lösung von (7.29) im Impuls- und Frequenzraum.

$$e(k, \omega) = \frac{ikf(k, \omega)}{Dk^2 - i\omega + \frac{1}{\tau}} + \frac{g(k, \omega)}{Dk^2 - i\omega + \frac{1}{\tau}} \quad (7.38)$$

$$\begin{aligned} \langle e(r, t) e(r', t) \rangle &= \int \frac{d\Gamma}{(2\pi)^4} \frac{\langle g(k, \omega) g(k', \omega') \rangle - kk' \langle f(k, \omega) f(k', \omega') \rangle}{(Dk^2 - i\omega + \frac{1}{\tau})(Dk'^2 - i\omega' + \frac{1}{\tau})} e^{ikr} e^{ik'r'} e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t} \\ &= \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{A}{\tau} + k^2 BD \right) \frac{e^{i(r-r')k}}{(Dk^2 + \frac{1}{\tau})^2 + \omega^2} \end{aligned}$$

Das erste Integral kann durch zweimaliges Anwenden des Residuensatzes berechnet werden.

$$\begin{aligned} \frac{A}{\tau} \int \frac{dk}{2\pi} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i(r-r')k}}{(\omega + i(Dk^2 + \frac{1}{\tau}))(\omega - i(Dk^2 + \frac{1}{\tau}))} &= \frac{A}{2D\tau} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{i(r-r')k}}{(k + i\frac{1}{\sqrt{D\tau}})(k - i\frac{1}{\sqrt{D\tau}})} \\ &= \frac{A}{4} \frac{e^{-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D\tau}}}}{\sqrt{D\tau}}. \end{aligned}$$

Für das zweite Integral erhält man auf ähnliche Weise

$$\begin{aligned} \frac{B}{2} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{k^2 e^{i(r-r')k}}{(k + i\frac{1}{\sqrt{D\tau}})(k - i\frac{1}{\sqrt{D\tau}})} &= \frac{B}{2} \int \frac{dk}{2\pi} \left[\frac{k^2}{k^2 + \frac{1}{D\tau}} + \frac{\frac{1}{D\tau}}{k^2 + \frac{1}{D\tau}} - \frac{\frac{1}{D\tau}}{k^2 + \frac{1}{D\tau}} \right] e^{i(r-r')k} \\ &= \frac{B}{2} \underbrace{\int \frac{dk}{2\pi} e^{i(r-r')k}}_{\delta(r-r')} - \frac{B}{2\tau D} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{i(r-r')k}}{(k + i\sqrt{\frac{1}{D\tau}})(k - i\sqrt{\frac{1}{D\tau}})} \\ &= c_V k_B T^2 \delta(r - r') - \frac{B}{4} \frac{e^{-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D\tau}}}}{\sqrt{D\tau}}. \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich

$$\langle e(r, t) e(r', t') \rangle_{stat} = c_V k_B T^2 \delta(r - r') + \frac{A - B}{4} \frac{e^{-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D}\tau}}}{\sqrt{D}\tau}. \quad (7.39)$$

Im Grenzfall $\tau \rightarrow \infty$ geht die stationäre Korrelation in die Gleichgewichtskorrelation über.

$$\begin{aligned} \tau \rightarrow \infty : \quad & \langle e(r, t) e(r', t') \rangle_{stat} = c_V k_B T^2 \delta(r - r') \\ \tau \rightarrow 0 : \quad & \langle e(r, t) e(r', t') \rangle_{stat} = \left(c_V k_B T^2 + \frac{A - B}{2} \right) \delta(r - r') \end{aligned}$$

Um die Abhängigkeit des stationären Wertes von der Fluktuationsrate τ^{-1} zu untersuchen, betrachten wir die Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ zwischen Teilchen i und Teilchen $i+n$ mit $n=3, \dots, 12$. Mit der Beziehung $\alpha \sim \tau$ und nach (7.37) sollte der Zusammenhang zwischen n und $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ mit $n > 0$ gegeben sein durch

$$\langle e(r, t) e(r', t') \rangle_{stat} \sim \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \exp\left(-\frac{n}{\sqrt{\alpha}}\right). \quad (7.40)$$

In Abbildung 7.12 ist $\sqrt{\alpha} \langle e(r, t) e(r', t') \rangle_{stat}$ gegen $n/\sqrt{\alpha}$ aufgetragen. Nach (7.40) sollte dieser Verlauf exponentiell sein und insbesondere für $n/\sqrt{\alpha} \rightarrow 0$ gegen einen konstanten Wert gehen. Die Datenpunkte erfüllen beide Kriterien qualitativ gut.

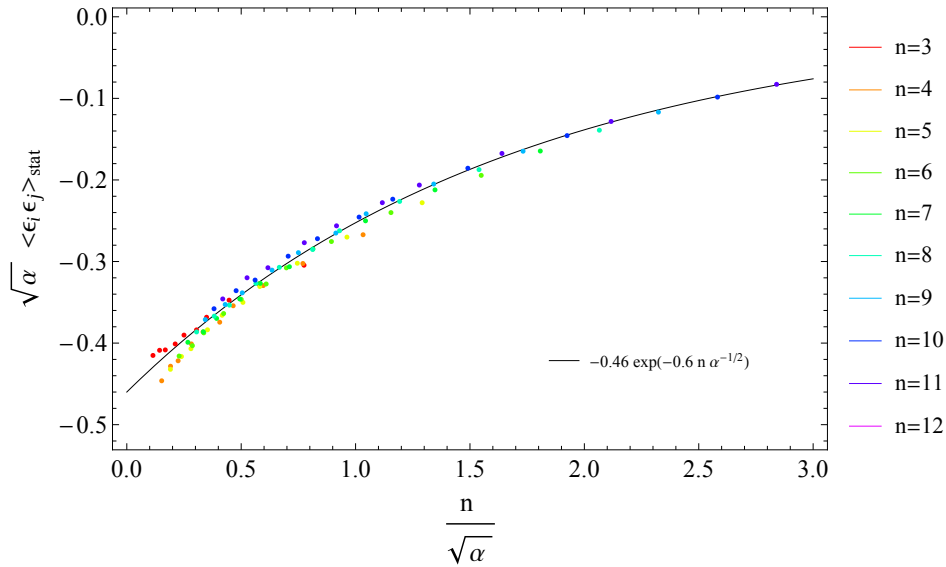


Abbildung 7.12: Skalenplot des asymptotischen Wertes der Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ für $n=3, \dots, 12$

7.4 Auswirkung der Teilchendichte

Da die Quasiteilchen immer nur an der gleichen Stelle ausgetauscht werden und die Teilchenzahl immer noch eine Erhaltungsgröße darstellt, erwartet man, dass in einer Observablen, die von der Teilchendichte abhängt, immer noch algebraische long-time tails auftreten. Um dies zu überprüfen, betrachten wir den Verlauf der Größen $\langle \rho_i \rho_{i+1} \rangle = \langle |x_{i-1} - x_i| |x_i - x_{i+1}| \rangle$ und $\langle \rho_{i+1} \rangle = \langle |x_i - x_{i+1}| \rangle$, wobei x_i die Position des i -ten Teilchens bezeichnet. Die Observable $\langle \rho_i \rho_{i+1} \rangle - \langle \rho_i \rangle \langle \rho_{i+1} \rangle$ ist in Abbildung 7.13 für $\alpha = 14$ dargestellt.

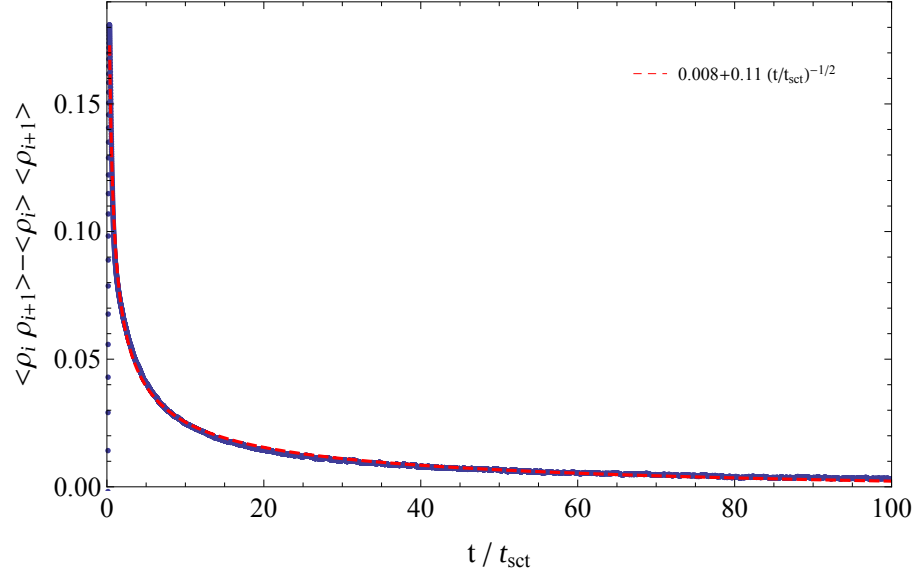


Abbildung 7.13: Verlauf für $\alpha = 14$ in Einheiten der Länge pro Teilchen $(L/N)^2$

Es zeigt sich, dass der zeitliche Verlauf der Größe $\langle \rho_i \rho_{i+1} \rangle - \langle \rho_i \rangle \langle \rho_{i+1} \rangle$ unabhängig von der Fluktuationrate ist und insbesondere für kleine Werte von α , wie in Abbildung 7.13 zu sehen, mit $t^{-1/2}$ abfällt. Die Tatsache, dass die Größe $\langle \rho_i \rho_{i+1} \rangle - \langle \rho_i \rangle \langle \rho_{i+1} \rangle$ für große Zeiten nicht exakt auf Null geht, zeigt, dass es auch im stationären Zustand Dichtefluktuationen gibt.

Weiter stellt sich die Frage, ob der Energietransport durch den Dichtetransport beeinflusst wird. Die Gleichung für die Energiestromdichte müsste in lineare Hydrodynamik durch einen Beitrag des Gradienten der Teilchendichte ergänzt werden.

$$j(r, t) = -D \nabla e(r, t) - \tilde{D} \nabla n(r, t) - \dots \quad (7.41)$$

8 Ausblick

Der Fluktuationsprozess kann variiert werden, indem eine andere Impulsverteilung für die hinzugefügten Quasiteilchen gewählt wird. Fügt man die Quasiteilchen mit gleichverteilten Impulsen in das System ein, werden keine neuen Korrelationen aufgebaut und die Energiekorrelation nächster Nachbarn geht für große Zeiten gegen Null. Für Gleichung (7.37) würde dies bedeuten, dass der Vorfaktor A-B verschwindet und sich somit (7.37) für $|r - r'|^2 \ll Dt$ vereinfacht zu

$$\begin{aligned} \langle e(r, t) e(r', t') \rangle &= \frac{C - \frac{B}{2}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-\frac{2t}{\tau}) \exp\left(-\frac{(r-r')^2}{8Dt}\right)}{\sqrt{Dt}} \\ &\sim \frac{1}{\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{2t}{\tau}\right). \end{aligned} \quad (8.42)$$

In den Abbildungen 8.14, 8.15 und 8.16 ist die Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ für $\alpha = 17.77$, $\alpha = 35.07$ und $\alpha = 53.3$ dargestellt, wobei die Impulse der hinzugefügten Quasiteilchen gleichverteilt sind. Die Fit-Funktionen haben die Form $a\sqrt{\frac{1}{t}} \exp(-2t/\tilde{\tau})$.

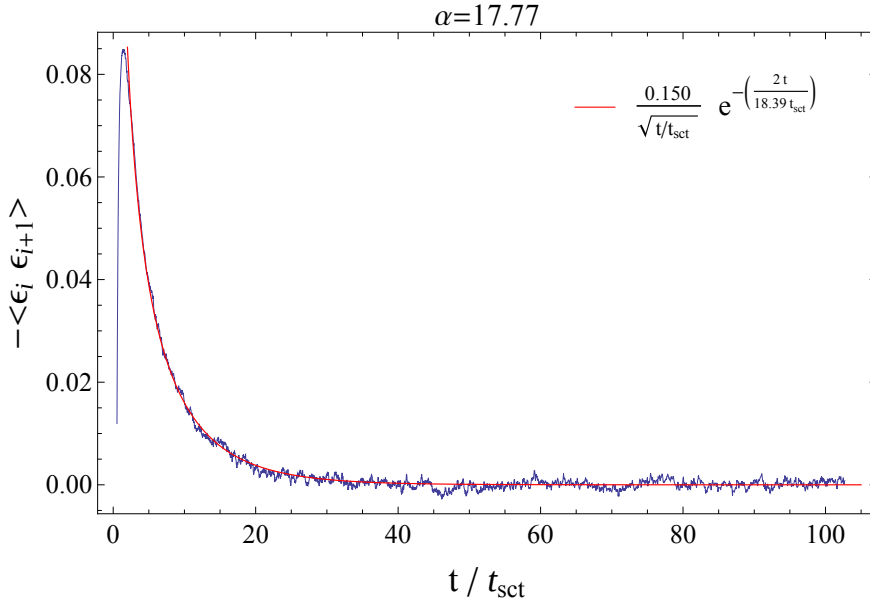


Abbildung 8.14: Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ für $\alpha = 53.3$

Nach dem gewählten Ansatz sollte $\tilde{\tau}$ der Fluktuationszeit τ entsprechen. In den hier gewählten dimensionslosen Einheiten würde man erwarten, dass $\tilde{\tau}$ durch α gegeben ist. Den Abbildungen 8.15 und 8.16 kann man entnehmen, dass es zu Abweichungen von dieser erwarteten Beziehung kommt. So ist zum Beispiel für $\alpha = 53.3$ der Fitparameter um 25% kleiner. Dies ist ein Hinweis, dass weitere Korrekturterme in (7.29) berücksichtigt werden müssen.

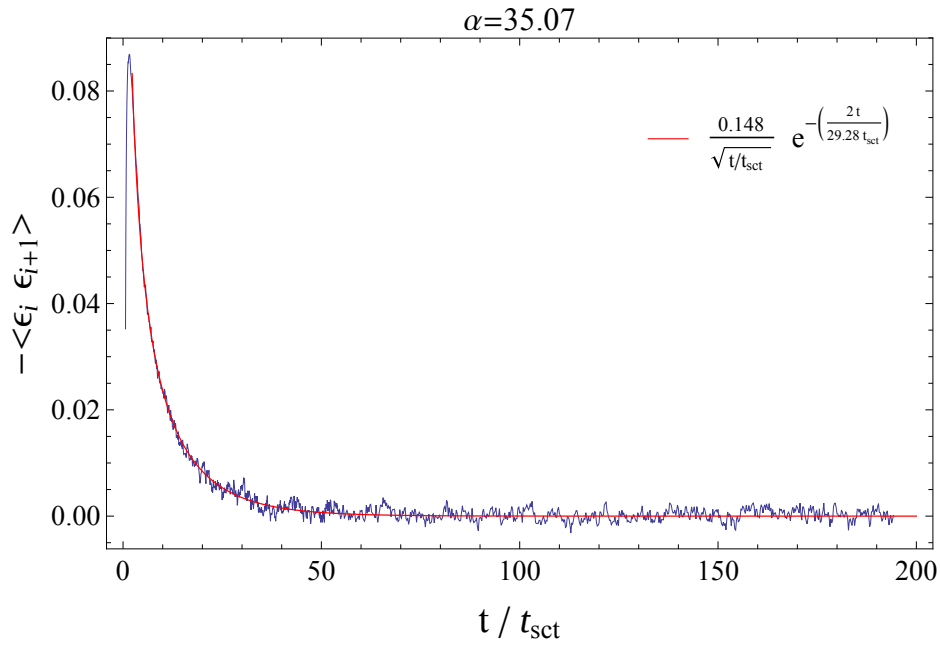


Abbildung 8.15: Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ für $\alpha = 35.07$

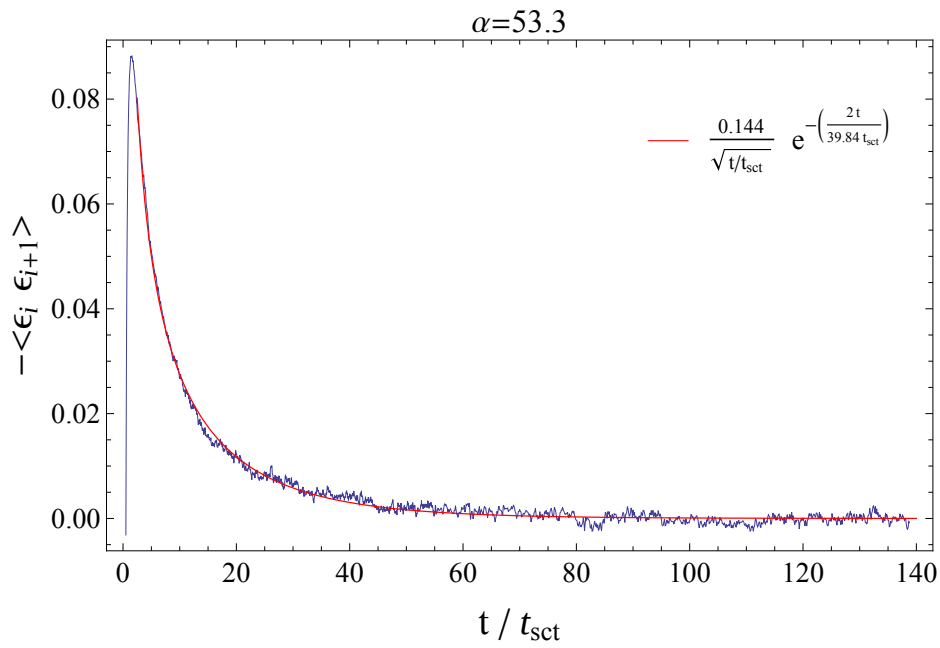


Abbildung 8.16: Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ für $\alpha = 53.3$

Eine weitere Möglichkeit besteht darin eine Wahrscheinlichkeitsverteilung zu wählen, bei der die hinzugefügten Quasiteilchen nicht im Mittel die Energie Null haben. In diesem Fall würde man erwarten, dass das System in einen Zustand mit endlicher Temperatur thermalisiert. Wählt man anstelle der $\sin^2(q)$ -Verteilung die Verteilung $q^2 \sin^2(q)$ (Abbildung 8.17), ist es deutlich wahrscheinlicher ein Quasiteilchen mit Energie $\epsilon < 0$ in das System einzufügen. Dies führt dazu, dass die Vorzeichen der Energien zweier benachbarter Teilchen mit größerer Wahrscheinlichkeit gleich ist und somit der asymptotische Wert der Energie-Energie-Korrelation $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle$ positiv ist. Für $\alpha = 18$ ist dieser Verlauf in Abbildung 8.18 dargestellt. Abbildung 8.19 kann man entnehmen, dass das System bei diesem Protokoll exponentiell relaxiert.

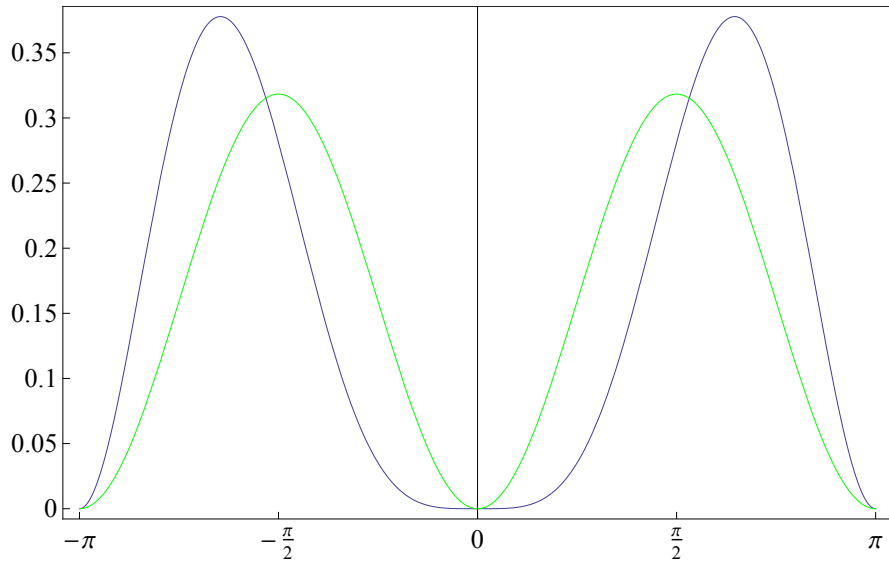


Abbildung 8.17: Impulsverteilungen $p_q \sim \sin^2(q)$ (grün) und $p_q \sim q^2 \sin^2(q)$ (blau)

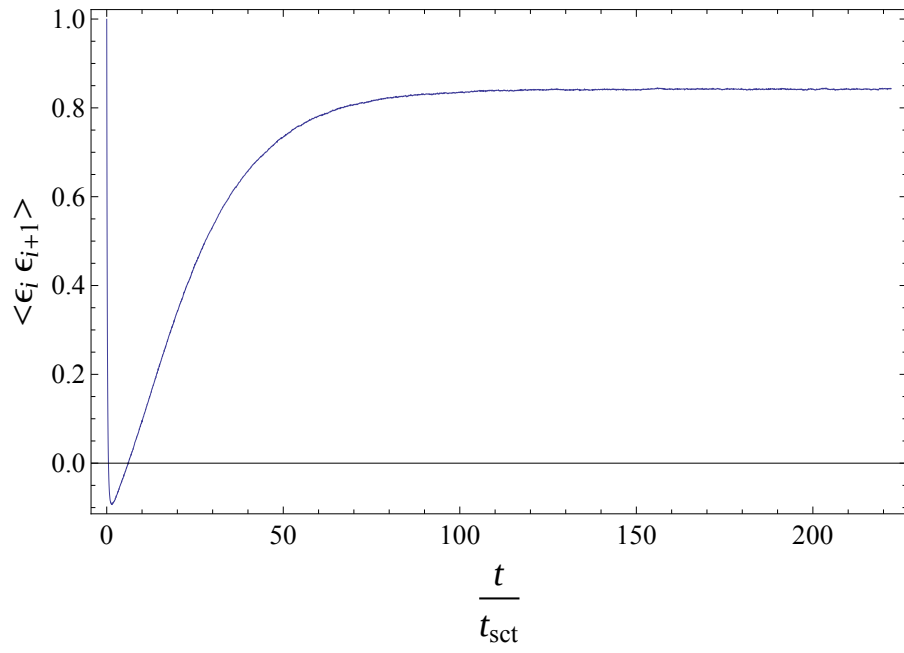


Abbildung 8.18: Energie-Energie-Korrelation für $\alpha = 18$ und Impulsverteilung $p_q \sim q^2 \sin^2(q)$

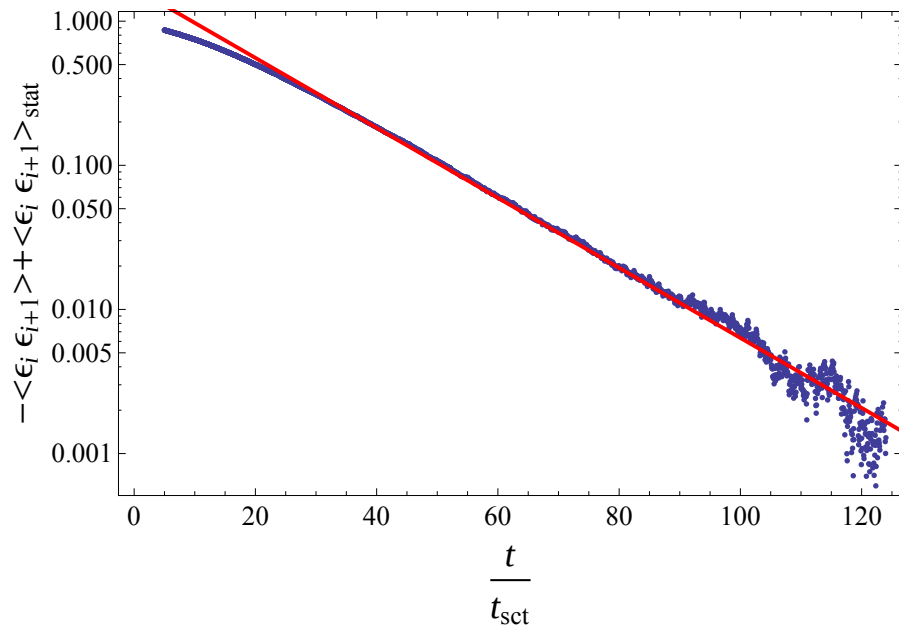


Abbildung 8.19: einfach logarithmische Darstellung des Verlaufs $-\langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle + \langle \epsilon_i \epsilon_{i+1} \rangle_{\text{stat}}$

9 Fazit

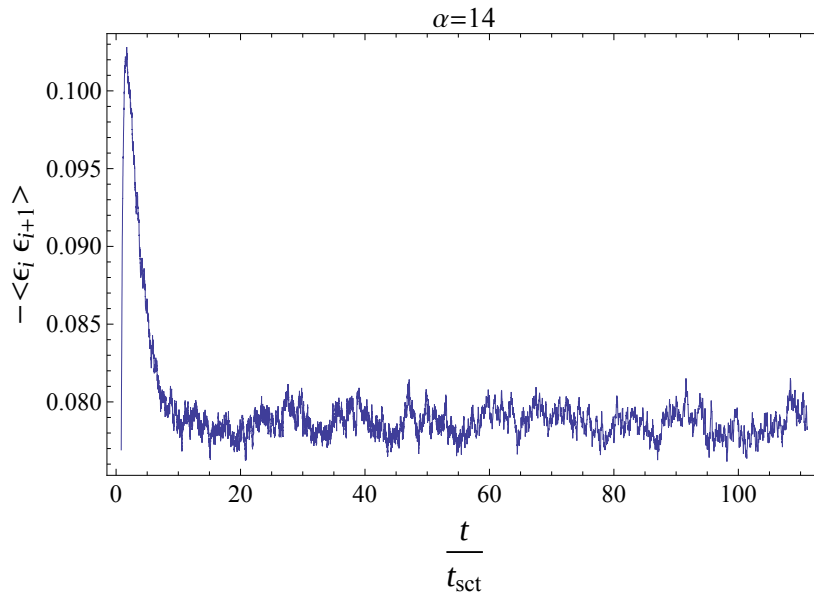
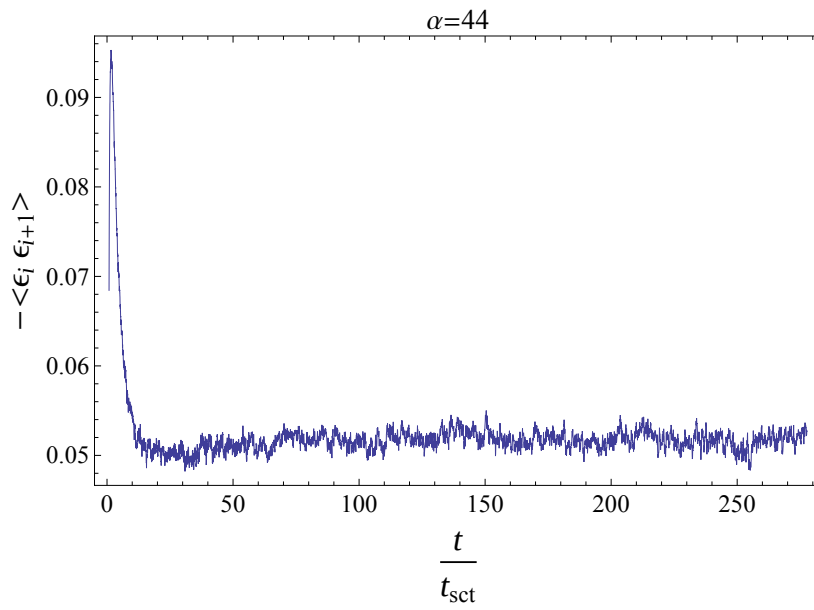
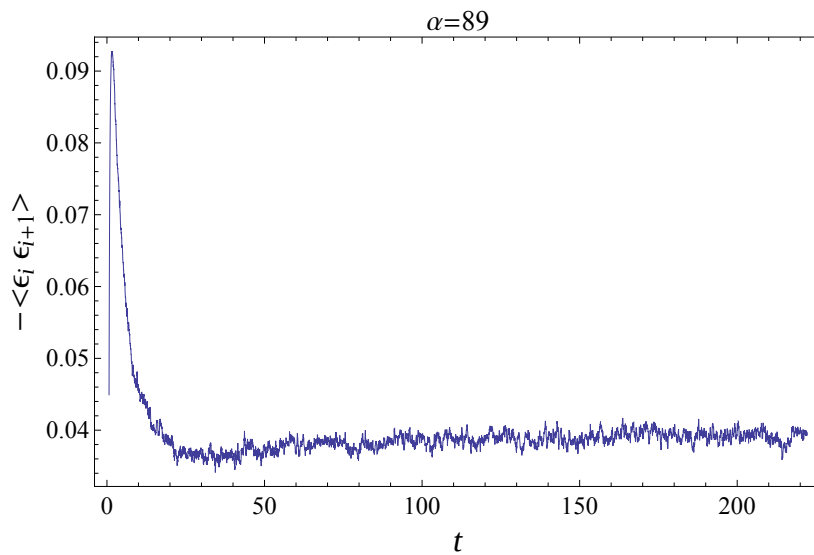
In dieser Arbeit konnte gezeigt werden, dass durch Verletzung der Energieerhaltung algebraische long-time tails in der Zeitenwicklung der Energie-Energie-Korrelation zerstört werden können. In welchen stationären Zustand das System übergeht, hängt dabei vom gewählten Fluktuationsprozess ab, wobei sich diese Arbeit auf den Fall konzentriert, dass die mittlere Energie der hinzugefügten Teilchen wie die mittlere Energie des Gesamtsystems Null ist. Weiter konnte das Skalenverhalten einer analytischen Lösung für die Energie-Energie-Korrelation bestätigt werden.

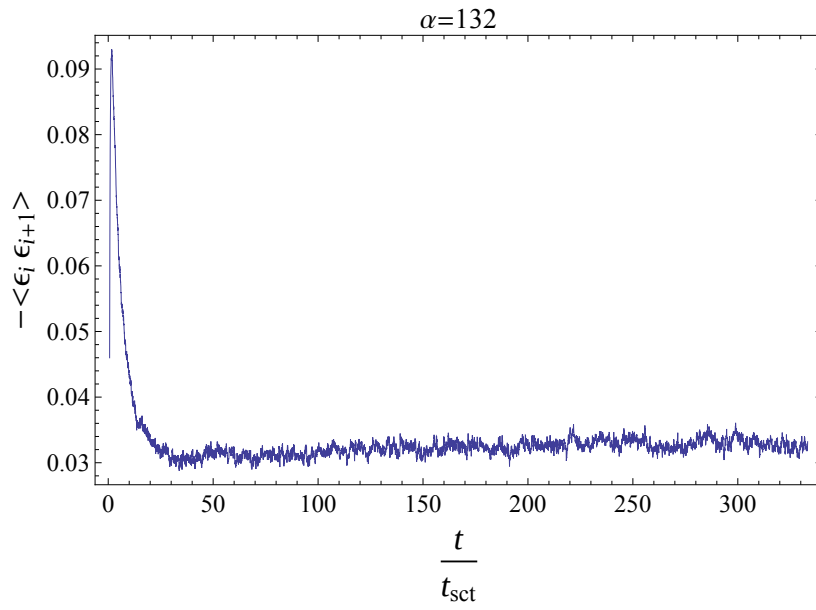
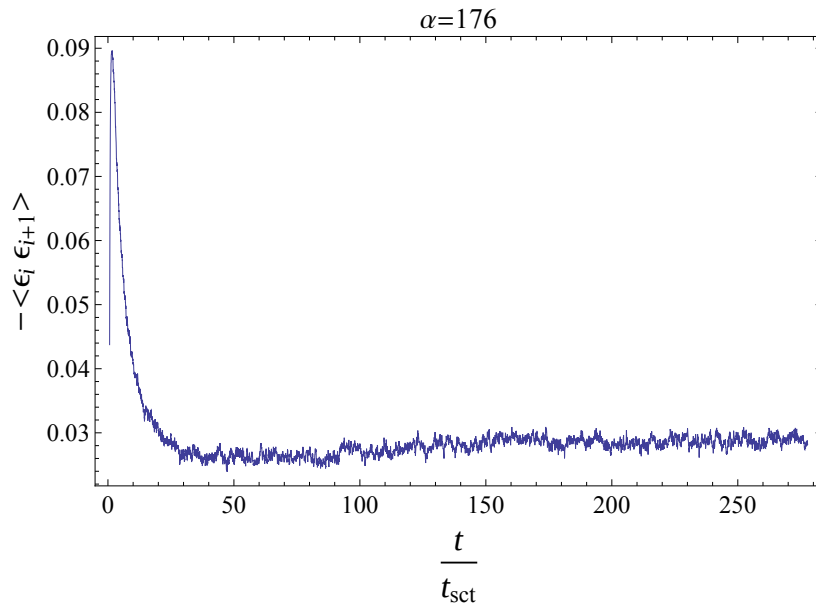
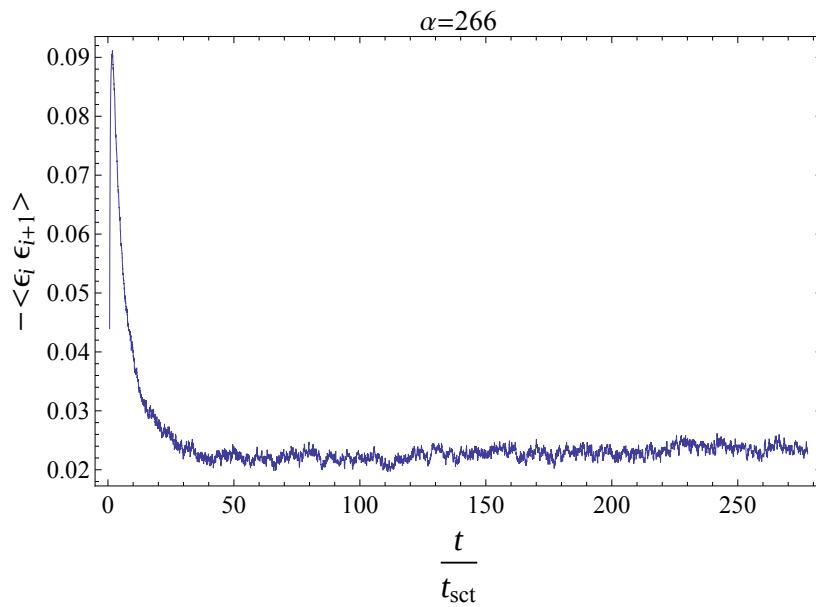
$$\langle e(r, t) e(r', t') \rangle = \frac{A - B}{4} \frac{e^{-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D}\tau}}}{\sqrt{D}\tau} - \frac{A - B}{4\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-2t/\tau}}{\sqrt{Dt}} - \frac{\frac{B}{2} - C}{2\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}}}{\sqrt{Dt}}.$$

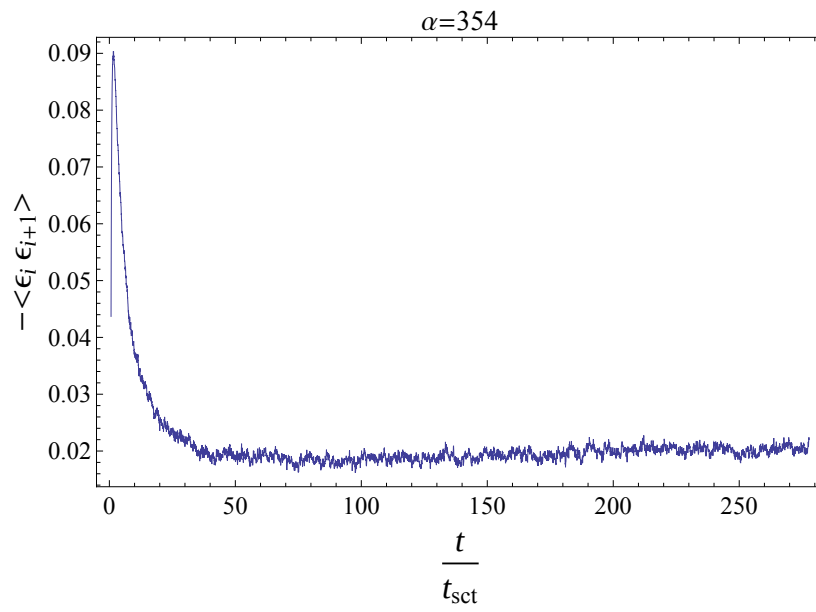
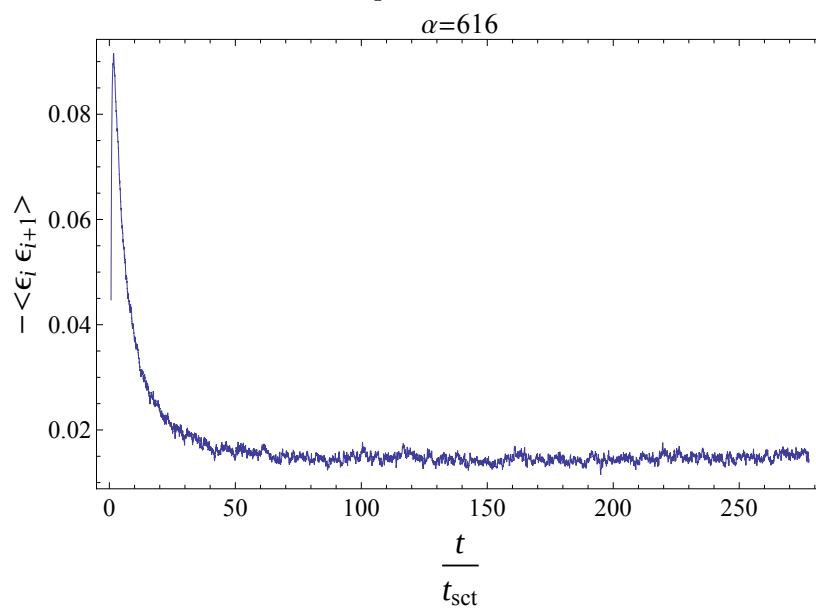
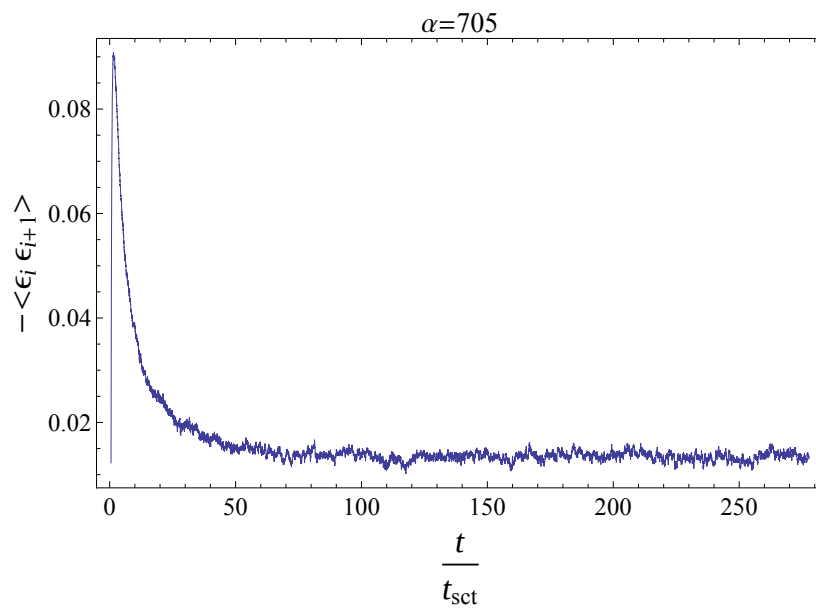
Da die Quasiteilchen immer nur an gleicher Position ausgetauscht werden und die Teilchenzahl immer noch erhalten ist, sollte in Observablen, die von der Dichte abhängen, immer noch long-time tails sichtbar sein. Dies konnte mit der Observablen $\langle \rho_i \rho_{i+1} \rangle = \langle |x_{i-1} - x_i| |x_i - x_{i+1}| \rangle$ nachgewiesen werden.

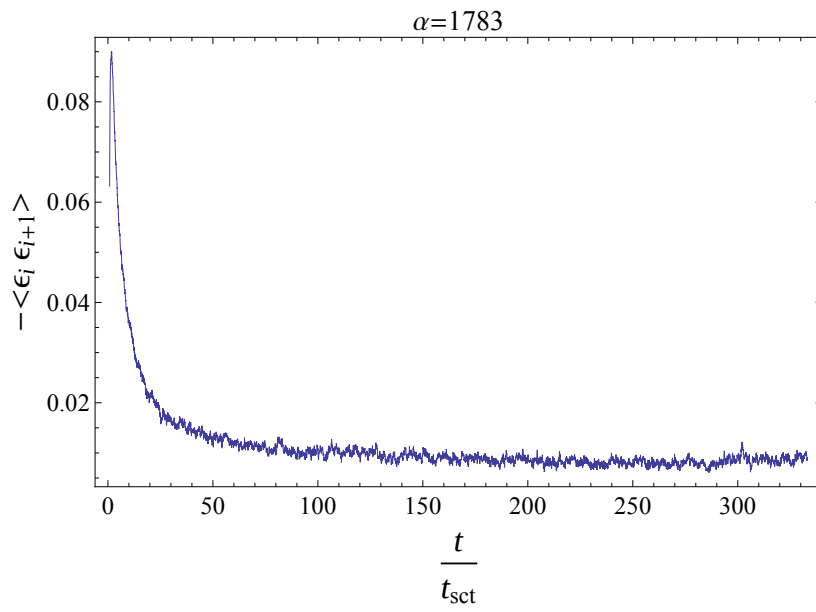
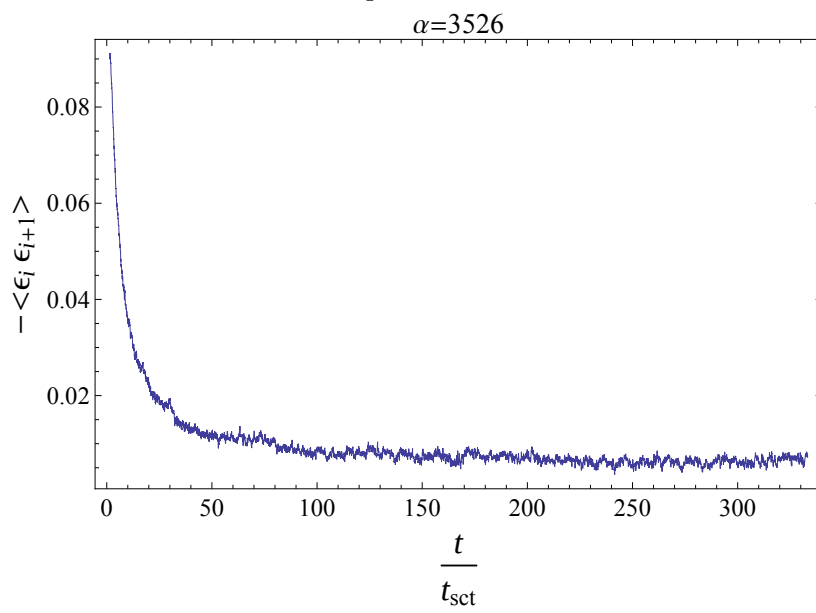
10 Anhang

10.1 Teil A

Abbildung 10.20: $\alpha = 14$ Abbildung 10.65: $\alpha = 44$ 

Abbildung 10.23: $\alpha = 132$ Abbildung 10.65: $\alpha = 176$ Abbildung 10.66: $\alpha = 266$

Abbildung 10.26: $\alpha = 354$ Abbildung 10.65: $\alpha = 616$ Abbildung 10.66: $\alpha = 705$

Abbildung 10.29: $\alpha = 1783$ Abbildung 10.65: $\alpha = 3526$

10.2 Teil B

Zur Herleitung von Gleichung (7.37) werden die folgenden Beziehungen, Abkürzungen und Näherungen verwendet

$$\Delta rs := \frac{|r - r'|}{\sqrt{D\tau}}, \quad \Delta rD := \frac{|r - r'|}{2\sqrt{D}}$$

$$(1) \quad \langle g(r, t) f(r', t') \rangle = \langle g(r, t) e_0(r') \rangle = \langle e_0(r) f(r', t') \rangle = 0$$

$$(2) \quad \langle e_0(r) e_0(r') \rangle = C \delta(r - r')$$

$$(3) \quad \langle g(r, t) g(r', t') \rangle = \frac{A}{\tau} \delta(r - r') \delta(t - t')$$

$$(4) \quad \langle f(r, t) f(r', t') \rangle = BD \delta(r - r') \delta(t - t')$$

$$(5) \quad t\sqrt{\frac{D}{\tau}} > |r - r'| \neq 0$$

$$\tilde{G}_D(r - r', t - t') = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t')}} \exp\left(-\frac{(r - r')^2}{4D(t - t')}\right) \theta(t - t')$$

$$e(r, t) = \int dr_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t) e_0(r) + \int dr_1 \int_0^\infty dt_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) (\nabla f(r_1, t_1) + g(r_1, t_1))$$

$$\begin{aligned} \langle e(r, t) e(r', t') \rangle &\stackrel{(1)}{=} \int dr_1 \int dr_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t) \tilde{G}_D(r' - r_2, t) \langle e_0(r_1) e_0(r_2) \rangle \\ &\quad + \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \langle g(r_1, t_1) g(r'_2, t_2) \rangle \\ &\quad + \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \\ &\quad \quad \quad \langle \nabla_{r_1} f(r_1, t_2) \nabla_{r_2} f(r_1, t_2) \rangle \end{aligned}$$

erster Term:

$$\begin{aligned} I &= \int dr_1 \int dr_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t) \tilde{G}_D(r' - r_2, t) \langle e_0(r_1) e_0(r_2) \rangle \\ &\stackrel{(2)}{=} C \int dr_1 \int dr_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t) \tilde{G}_D(r' - r_2, t) \delta(r_1 - r_2) \\ &= C \int dr_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t) \tilde{G}_D(r' - r_1, t) \\ &= C e^{-2t/\tau} G_{2D}(r - r', t) \\ &= \frac{C}{2\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-\frac{2t}{\tau}} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}}}{\sqrt{Dt}} \end{aligned}$$

zweiter Term:

$$\begin{aligned}
II &= \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \langle g(r_1, t_1) g(r'_2, t_2) \rangle \\
&\stackrel{(3)}{=} \frac{A}{\tau} \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \delta(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2) \\
&= \frac{A}{\tau} \int dr_1 \int_0^\infty dt_1 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_1, t - t_1) \\
&= \frac{A}{\tau} \int_0^\infty dt_1 e^{-2(t-t_1)/\tau} G_{2D}(r - r', t - t_1) \\
&= \frac{A}{\tau} \int_0^t dt_1 \frac{e^{-2t_1/\tau}}{\sqrt{8\pi Dt_1}} \exp\left(-\frac{(r - r')^2}{8Dt_1}\right) \\
&= \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \int_0^{t/\tau} dt_1 \frac{e^{-2t_1}}{\sqrt{t_1}} \exp\left(-\frac{(\Delta rs)^2}{8t_1}\right) \\
&= \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\Delta rs} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{\Delta rs - 4t/\tau}{2\sqrt{2}\sqrt{t/\tau}}\right) - e^{2\Delta rs} \operatorname{erfc}\left(\frac{\Delta rs + 4t/\tau}{2\sqrt{2}\sqrt{t/\tau}}\right) \right] \right) \\
&= \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\Delta rs} \left[2 - (1 + e^{2\Delta rs}) \operatorname{erfc}\left(\frac{\Delta rs + 4t/\tau}{2\sqrt{2}\sqrt{t/\tau}}\right) \right] \right) \\
&\stackrel{(5)}{\approx} \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\Delta rs} \left[2 - (1 + e^{2\Delta rs}) \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{2t}{\tau}}\right) \right] \right) \\
&\stackrel{(5)}{\approx} \frac{A}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\Delta rs} - \frac{e^{-2t/\tau}}{2\sqrt{t/\tau}} \right] \\
&= \frac{A}{4} \frac{e^{-\Delta rs}}{\sqrt{D\tau}} - \frac{A}{4\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-2t/\tau}}{\sqrt{Dt}}
\end{aligned}$$

dritter Term:

$$\begin{aligned}
III &= \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \langle \nabla_{r_1} f(r_1, t_2) \nabla_{r_2} f(r_1, t_2) \rangle \\
&= DB \int dr_1 \int dr_2 \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \nabla_{r_1} \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \nabla_{r_2} \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_2) \delta(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2) \\
&= DB \int dr_1 \int_0^\infty dt_1 \nabla_{r_1} \tilde{G}_D(r - r_1, t - t_1) \nabla_{r_1} \tilde{G}_D(r' - r_2, t - t_1) \\
&= \frac{B}{16D^2\pi} \int dr_1 \int_0^t dt_1 \frac{e^{-2t_1/\tau}}{t_1^3} (r - r_1)(r' - r_1) \exp\left(-\frac{(r - r_1)^2(r' - r_1)^2}{4Dt_1}\right) \\
&= \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 \frac{e^{-2t_1/\tau}}{t_1^{5/2}} e^{-\frac{(\Delta r_s)^2}{8t_1}} \left(t_1 - \frac{(r - r')^2}{4D}\right) \\
&= \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{2}{(\Delta r D)^2} \frac{1}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 e^{-2t_1/\tau} \frac{(\Delta r D)^2}{2t_1^2} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} \left(\sqrt{t_1} - \frac{(\Delta r D)^2}{\sqrt{t_1}}\right) \\
&\stackrel{(5)}{=} \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{2}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 e^{-2t_1/\tau} \left(e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}}\right)' \left(\frac{\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2} - \frac{1}{\sqrt{t_1}}\right) \\
&\stackrel{p.I.}{=} \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{2}{\sqrt{D}} \left(\left[e^{-2t_1/\tau} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} \left(\frac{\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2} - \frac{1}{\sqrt{t_1}}\right) \right]_0^t - \int_0^t dt_1 e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} \left(e^{-2t_1/\tau} \left(\frac{\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2} - \frac{1}{\sqrt{t_1}}\right) \right)' \right) \\
&= \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{2}{\sqrt{D}} e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}} \left(\frac{4D\sqrt{t}}{(r - r')^2} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \\
&\quad - \underbrace{\frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \frac{2}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau} \left(\frac{1}{2t_1^{3/2}} + \frac{1}{\sqrt{t_1}} \left(\frac{1}{2(\Delta r D)^2} + \frac{2}{\tau} \right) - \frac{2\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2\tau} \right)}_{\Gamma}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \underbrace{\frac{2}{\sqrt{D}} \frac{1}{(\Delta r D)^2} \int_0^t dt_1 \frac{(\Delta r D)^2}{2t_1^2} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau} \sqrt{t_1}}_{\Delta} \\
&\quad + \frac{2}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau} \left(\underbrace{\frac{1}{2(\Delta r D)^2 \sqrt{t_1}}}_{A1} + \underbrace{\frac{2}{\tau \sqrt{t_1}}}_{A2} - \underbrace{\frac{2\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2 \tau}}_{A3} \right) \\
\Delta &\stackrel{(5)}{=} \frac{2}{\sqrt{D}} \frac{1}{(\Delta r D)^2} \int_0^t dt_1 e^{-2t_1/\tau} \sqrt{t_1} \left(e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} \right)' \\
&\stackrel{p.I.}{=} \frac{2}{\sqrt{D}(\Delta r D)^2} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t}} e^{-2t/\tau} \sqrt{t} - \frac{2}{\sqrt{D}} \int_0^t dt_1 e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau} \left(\underbrace{\frac{1}{2(\Delta r D)^2 \sqrt{t_1}}}_{A1} - \underbrace{\frac{2\sqrt{t_1}}{(\Delta r D)^2 \tau}}_{A3} \right) \\
\Rightarrow \Gamma &= \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{D}(\Delta r D)^2} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t}} e^{-2t/\tau} + \frac{4}{\sqrt{D}\tau} \int_0^t dt_1 \sqrt{\frac{1}{t_1}} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
III &= \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \left[\frac{2}{\sqrt{D}} e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}} \left(\frac{4D\sqrt{t}}{(r-r')^2} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{D}(\Delta r D)^2} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t}} e^{-2t/\tau} - \frac{4}{\sqrt{D}\tau} \int_0^t dt_1 \sqrt{\frac{1}{t_1}} e^{-\frac{(\Delta r D)^2}{2t_1}} e^{-2t_1/\tau} \right] \\
&= \frac{B}{8\sqrt{2\pi}} \left[-\frac{2}{\sqrt{Dt}} e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}} + \sqrt{\frac{2\pi}{D\tau}} e^{\frac{2\Delta r D}{\sqrt{\tau}}} \left(-2 + \operatorname{erfc} \left(\frac{2t - \Delta r D \sqrt{\tau}}{\sqrt{2t}\sqrt{\tau}} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{\frac{4\Delta r D}{\sqrt{\tau}}} \operatorname{erfc} \left(\frac{2t + \Delta r D \sqrt{\tau}}{\sqrt{2t}\sqrt{\tau}} \right) \right) \right] \\
&\stackrel{(5)}{\approx} -\frac{B}{4} \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}} - \frac{B}{4} \frac{e^{\frac{|r-r'|}{\sqrt{D\tau}}}}{\sqrt{D\tau}} + \frac{B}{4} \frac{e^{-2t/\tau}}{\sqrt{2\pi Dt}}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle e(r, t) e(r', t') \rangle = \frac{A - B e^{-\frac{|r-r'|}{\sqrt{D\tau}}}}{4} \frac{1}{\sqrt{D\tau}} - \frac{A - B e^{-2t/\tau}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{Dt}} - \frac{\frac{B}{2} - C}{2\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-2t/\tau} e^{-\frac{(r-r')^2}{8Dt}}}{\sqrt{Dt}}$$

Literatur

- [1] Jonathan Lux, Jan Müller, Aditi Mitra, Achim Rosch, *Hydrodynamic long-time tails after a quantum quench*, Phys. Rev. A **89** 053608
- [2] Peter Barmettler, Corinna Kollath, *Quantum gases in optical lattices*. arXiv:1312.5772v1
- [3] Immanuel Bloch, *Ultracold quantum gases in optical lattices*, Nature Physics **1**, 23 - 30
- [4] D. C. McKay and B. DeMarco: *Cooling in strongly correlated optical lattices: prospects and challenges*, arXiv:1010.0198
- [5] Alexander Altland and Ben Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, Second edition, 2010
- [6] Jenő Sólyom, *Fundamentals of the Physics of Solids Volume 2*, Springer, Berlin Heidelberg, 2009
- [7] Simone Zirardo and Giuseppe E. Santoro, *Relaxation and Thermalization after a Quantum Quench: Why Localization is Important*, Phys. Rev. A **87** 064201
- [8] Subir Sachdev and A. P. Young: *Low Temperature Relaxational Dynamics of the Ising Chain in a Transverse Field*, Phys. Rev. Lett. **78** 2220
- [9] Franz Schwabl, *Statistische Mechanik*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 3.Auflage, 2006
- [10] J. M. Zhang, C. Shen, W. M. Liu: *Quantum quench dynamics of the Bose-Hubbard model at finite temperatures*. Phys. Rev. A **83** 063622
- [11] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pergamon Press, Third Edition revised and enlarged

Danksagung

Ich danke Prof. Dr. Achim Rosch für die Auswahl eines interessanten Themas und die intensive Betreuung während meiner gesamten Arbeit.

Weiter danke ich Jonathan Lux, der mir jederzeit bei Fragen weitergeholfen hat und der durch Berechnung von Formel (7.37) die Ergebnisse dieser Arbeit verständlicher gemacht hat.

Mein Dank gilt auch Michael Becker und Christoph Schütte, die Beide dazu beigetragen haben, mein Programm zu optimieren.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Köln, 29. Mai 2014

.....

