

Oszillatorische Parameteränderung in wechselwirkenden Quantensystemen

Bachelorarbeit im Fach Physik
vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Augsburg von

MARKUS DUTSCHKE

Juli 2011

Angefertigt am Lehrstuhl für Theoretische Physik III
Zentrum für Elektronische Korrelationen und Magnetismus
Institut für Physik der Universität Augsburg
bei Prof. Dr. D. Vollhardt
Zweitprüfer: Prof. Dr. T. Kopp

Kurzfassung

Im ersten Teil untersuchen wir die Anregungsenergie beim oszillierenden Zuschalten (engl. Ramp) einer Störung in Abhängigkeit von deren Zuschaltparametern innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Störungstheorie zweiter Ordnung. Wir finden hierbei, dass die optimale Form des Zuschaltens ein linearer Einschaltvorgang der Steigung Eins überlagert mit einer N -fachen Sinusschwingung ohne Phase ist. Die Anregungsenergie wird dabei um so geringer je größer N wird; in gleichem Maße muss allerdings auch die Amplitude der Sinusschwingung ($\propto N$) steigen. Der optimale Schaltverlauf richtet sich also nach der maximal realisierbaren Amplitude. Auch mit beränkter Amplitude lassen sich für solch einen Einschaltvorgang bei Schaltzeiten in der Größenordnung des inversen Hopping-Parameters energetische Verbesserungen erzielen, welche um so größer sind, je deutlicher die Korrelationsfunktion des Systems gepeakt ist.

Im zweiten Teil stellen wir fest, dass sich mit obigem Schaltverlauf auch beim Schalten durch quantenkritische Punkte in der Näherung des Kibble-Zurek-Mechanismus teils beachtliche energetische Verbesserungen erzielen lassen. Die mögliche maximale Energieersparnis ist dabei stark von einer Funktion mit den Parametern Schaltdauer und Oszillationszahl abhängig; wobei sich ein günstiger Wert für diese Funktion aus der Lösung einer transzendenten Gleichung ergibt. Dieses Ergebnis bedarf allerdings noch der Verifikation anhand eines konkreten Modells, wie zum Beispiel des Ising-Modells.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Auswertung der störungstheoretischen Anregungsenergie für oszillatorische Schaltvorgänge	7
2.1	Schaltvorgänge der Form: $r(s) = s + a \sin(n\pi s)$	9
2.1.1	Reduzierung auf gerade n	9
2.1.2	Diskussion von $F(x)$	10
2.1.3	Bestimmung der optimalen Amplitude a	11
2.1.4	Bestimmung der optimalen Oszillationszahl n	12
2.1.5	Beschränkungen bei der Parameterwahl	13
2.1.6	Wahl von n unter Beschränkungen	15
2.2	Schaltvorgänge der Form: $r(s) = us + v + a \sin(bs + d)$	16
2.2.1	Berechnung des Schaltspektrums $F(x)$	16
2.2.2	Bestimmung der optimalen Amplitude a	16
2.2.3	Bestimmung der optimalen Oszillationsgeschwindigkeit b	19
2.2.4	Die optimale Parameterwahl für den verallgemeinerten Schaltverlauf	20
2.3	Vergleich der Ergebnisse	23
2.3.1	Korrelationsfunktionen für die verschiedenen Einschaltvorgänge	23
2.3.2	Diskussion der Anregungsenergie für die verschiedenen Einschaltvorgänge	23
2.3.3	Vergleich des analytisch optimierten Schaltverlaufs mit dem numerisch optimierten aus der Literatur	26
3	Oszillatorisches Schalten durch einen quantenkritischen Punkt	29
3.1	Kibble-Zurek-Mechanismus (KZM)	29
3.2	Bestimmung des Auftaupunkts \hat{s}	30
3.3	Bestimmung des letztmöglichster Auftaupunkts	32
3.4	Näherung der optimale Amplitude a	33
3.5	Abschätzung des optimalen Parameters φ	34
3.6	Auswertung der Ergebnisse	38
4	Zusammenfassung und Ausblick	43
	Literaturverzeichnis	45

1 Einleitung

Ein vielversprechender Teilbereich der Physik der kondensierten Materie sind stark korrelierte Vielteilchensysteme. Durch starke Wechselwirkung zwischen den Elektronen eines Materials lassen sich dessen physikalische Eigenschaften massiv durch geringe äußere Einflüsse (wie das Anlegen elektrischer und magnetischer Felder) beeinflussen. Speziell beim Überschreiten bestimmter Schwellen (sogenannten quantenkritischen Punkten) ändern sich die Eigenschaften des Materials drastisch [4]. Solche quantenkritischen Punkte können auch von mehreren Parametern abhängen und bilden damit eine Art quantenkritische Oberfläche [8, 9]. In diesem Verhalten liegt großes Potential für zukünftige Entwicklungen, zum Beispiel in der Sensorik. Noch sind diese Materialien allerdings Gegenstand der Forschung und werden mit teils erheblichem experimentellem Aufwand erschlossen. Ein anderer Zugang zu wechselwirkenden Vielteilchensystemen sind Versuche mit kalten Atomen in optischen Fallen [6], die erst in jüngster Zeit möglich geworden sind. Um solche Untersuchungen durchzuführen, ist es nötig, die äußeren Parameter in einen beabsichtigten Ausgangszustand zu bringen. Da das System aber bei der Parameteränderung (oder Störung) im allgemeinen Energie absorbiert und damit unter Umständen seine Eigenschaften ändert, stellt sich die Frage, wie man diese Energieaufnahme minimieren kann. Ein möglicher Ansatz hierfür ist es, die Schaltzeit und den Verlauf des Anschaltvorgangs anzupassen. Da die Schaltzeit oft nur in geringem Maße eingestellt werden kann, liegt besonderes Augenmerk darauf, wie Störung zugeschaltet wird (engl. Ramp).

Hierbei gibt es die bereits länger bekannten Ansätze:

- linearer Einschaltvorgang: Die Störung wird hier linear zugeschaltet. Eine experimentell leicht zu realisierende Möglichkeit, die aber bezüglich der resultierende Anregungsenergie suboptimal ist.
- weicher Einschaltvorgang: Hierbei wird darauf geachtet, so viele Ableitungen des Schaltverlaufs stetig (besonders am Anfang und Ende des Zuschaltens der Störung) zu halten, bis das System auf eine zusätzliche stetige Ableitung nicht mehr mit einer Energieverringerung reagieren kann [2]. Dies führt speziell im Hinblick auf sehr lange Schaltzeiten zu den besten Ergebnissen, wird aber experimentell nur sehr schwer zu realisieren sein.

Neuerdings ist durch numerische Optimierung in [3] ein weiterer, nicht intuitiver, Ansatz entstanden, der ein oszillierendes Einschalten vorschlägt. Hierbei wird die Störung linear zugeschaltet und mit einer Sinusschwingung überlagert; der Realisierungsaufwand für solch einen Schaltvorgang dürfte zwischen dem linearen und dem weichen Schalten einzuordnen sein. Speziell im Hinblick auf kleine Schaltzeiten kann der oszillierende Schaltvorgang bessere Ergebnisse als der lineare bringen [3]. Für die Durchführbarkeit der numerische Optimierung wurden allerdings Einschränkungen getroffen, die praktisch nicht immer gelten müssen.

Deshalb befasst sich diese Arbeit analytisch mit diesen neuartigen oszillierenden Einschaltvorgängen. Hierbei soll die Anregungsenergie eines Systems beim Zuschalten einer Störung innerhalb der Gültigkeit der zweiten Ordnung Störungstheorie (Kapitel 2) und beim Schalten durch einen quantenkritischen Punkt (Kapitel 3) durch eine geeignete Wahl der Schaltparameter minimiert werden.

In Abschnitt 2.1 gehen wir dabei erst auf die einfachste, sich direkt aus [3] ergebende Form des oszillierenden Schaltens ein, während wir in Abschnitt 2.2 diesen Schaltverlauf ver-

allgemeinern. In Abschnitt 2.3 vergleichen wir den oszillierenden Einschaltvorgang mit den konkurrierenden Modellen des harten und des weichen Schaltens und betrachten, inwiefern unsere Ergebnisse mit denen von [3] übereinstimmen. In Kapitel 3 werden wir ausschließlich die in Abschnitt 2 für gut befundenen Schaltvorgänge hinsichtlich ihres Verhaltens beim Quantenphasenübergang untersuchen.

2 Auswertung der störungstheoretischen Anregungsenergie für oszillatorische Schaltvorgänge

Wie in [2] hergeleitet, lässt sich die Anregungsenergie pro Gitterplatz ΔE , die bei kleinen Störungen W des Hamiltonoperators H der Form

$$H(t) = H_0 + \kappa(t)W, \quad (2.1)$$

$$\kappa(t) = \Delta\kappa r(t/\tau), \quad (2.2)$$

$$r(t/\tau) = \begin{cases} 0 & \text{für } t \leq 0 \\ \text{beliebig} & \text{für } 0 < t < \tau \\ 1 & \text{für } t \geq \tau \end{cases} \quad (2.3)$$

entsteht, mit Hilfe der Störungstheorie zweiter Ordnung zu

$$\Delta E(\tau) = \Delta\kappa^2 \mathcal{E}(\tau) + \mathcal{O}(\Delta\kappa^3), \quad (2.4)$$

$$\mathcal{E}(\tau) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} R(\omega) F(\omega\tau), \quad (2.5)$$

$$F(x) = \left| \int_0^1 ds \left(\frac{dr}{ds} \right) \exp(ixs) \right|^2, \quad (2.6)$$

$$R(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{n \neq 0} |\langle \Phi_n | W | \Phi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - (\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_0)) \quad (2.7)$$

abschätzen, mit L : Anzahl der Gitterplätze.

Eine beispielhafte Funktion $\frac{R(\omega)}{\omega}$ ist in [3] für das Hubbardmodell in unendlichen Dimensionen mit $U = 0$ angegeben, wobei U die zugeschaltete Wechselwirkung ist (siehe Abbildung 2.1).

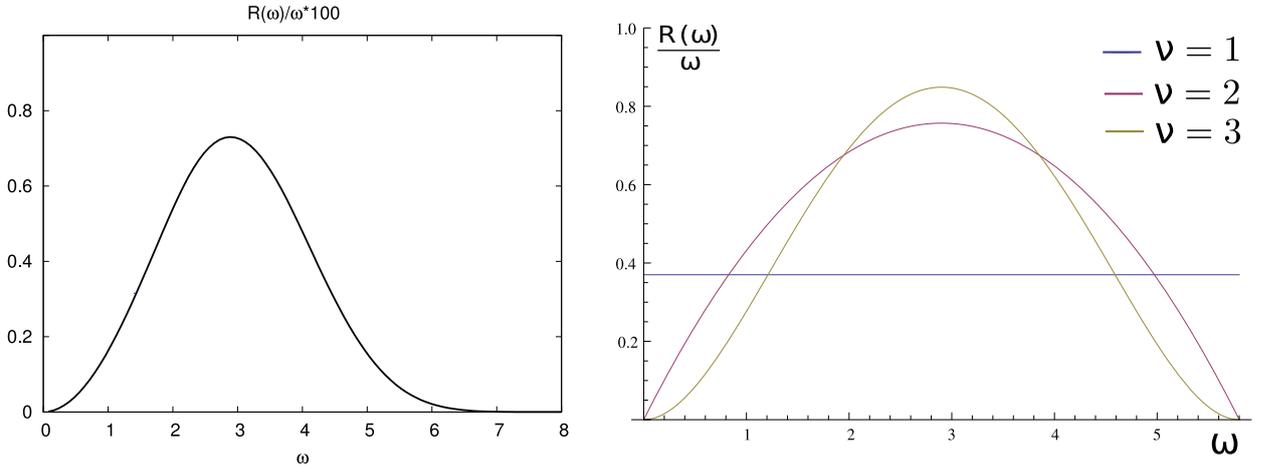


Abbildung 2.1: Vergleich: links: Korrelationsfunktion nach [3]; rechts: Korrelationsfunktion nach (2.8) für verschiedene ν und $\Omega = 5,8$.

Die Form dieser Kurve aufgreifend, wollen wir ein ähnliches $\frac{R(\omega)}{\omega}$ simulieren, mit

$$\frac{R(\omega)}{\omega} = \begin{cases} c(\omega(\omega - \Omega))^{\nu-1} & \text{für } 0 \leq \omega \leq \Omega \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.8)$$

Die Proportionalitätskonstante c ist dabei nur da, um $\frac{R(\omega)}{\omega}$ für verschiedene ν von der Höhe her aneinander anzupassen. c hat keinen Einfluss auf die Anregungsenergie, abgesehen von einer Streckung der Energieachse. Diese Korrelationsfunktionen sind in Abbildung 2.1 mit der des Hubbardmodells in unendlichen Dimensionen für $U = 0$ verglichen. Wir haben $\Omega = 5,8$ gewählt, um das Maximum bei $\omega \approx 2,9$ bestmöglich nachzuahmen. Dafür besteht eine Abweichungen bei $\omega \geq 5$. Während das Original erst bei $\omega \approx 8$ verschwindet, ist die Korrelationsfunktion (2.8) schon bei $\omega \approx 5,8$ auf Null abgefallen. Dennoch gibt uns unsere einfache Korrelationsfunktion die Möglichkeit, die Anregungsenergie für verschiedene Schaltverläufe mit verhältnismäßig geringem Aufwand zu simulieren. Für lange Schaltzeiten τ wird der Bereich um $\omega \approx 0$ sehr wichtig ($F(\omega\tau)$ wird gestaucht). Es gilt $R(\omega) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\propto} \omega^\nu$ mit $\nu > 0$. Da für das Hubbardmodell in unendlich vielen Dimensionen in der metallischen Phase (also auch bei $U = 0$) $\nu = 3$ ist [2], betrachten wir hauptsächlich diesen Fall. So können wir den Bereich um Null und den Bereich des Peaks der Korrelationsfunktion gut nachahmen.

2.1 Schaltvorgänge der Form: $r(s) = s + a \sin(n\pi s)$

Das Schaltspektrum berechnet sich nach (2.6) zu

$$F(x) = \left[\frac{\sin(x)}{x} + \frac{n\pi a x}{x^2 - (n\pi)^2} (-1)^n \sin(x) \right]^2 + \left[\frac{1 - \cos(x)}{x} + \frac{n\pi a x}{x^2 - (n\pi)^2} (1 - (-1)^n \cos(x)) \right]^2. \quad (2.9)$$

Die Herleitung für $F(x)$ ist in allgemeinerer Form in Abschnitt 2.2.1 aufgeführt.

2.1.1 Reduzierung auf gerade n

Wir bestimmen das Minimum der Anregungsenergie in Bezug auf die Amplitude a , indem wir

$$\frac{d\mathcal{E}}{da} = \frac{d}{da} \int_0^\Omega d\omega \frac{R(\omega)}{\omega} F(\omega\tau) \quad (2.10)$$

$$= \int_0^\Omega d\omega \frac{R(\omega)}{\omega} \frac{dF(\omega\tau)}{da} \quad (2.11)$$

$$\stackrel{!}{=} 0 \quad (2.12)$$

setzen. Dies ist erfüllt für

$$\begin{aligned} \frac{dF(\omega\tau)}{da} &= \left\{ 2 \left[\frac{\sin(\omega\tau)}{\omega\tau} + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} (-1)^n \sin(\omega\tau) \right] \frac{n\pi \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - n^2 \pi^2} (-1)^n \sin(\omega\tau) \right. \\ &\quad \left. + 2 \left[\frac{1 - \cos(\omega\tau)}{\omega\tau} + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} (1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) \right] \right. \\ &\quad \left. \times \frac{n\pi \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - n^2 \pi^2} (1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) \right\} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$= 0 \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow &\left[\frac{\sin(\omega\tau)}{\omega\tau} + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} (-1)^n \sin(\omega\tau) \right] (-1)^n \sin(\omega\tau) \\ &+ \left[\frac{1 - \cos(\omega\tau)}{\omega\tau} + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} (1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) \right] (1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow &\frac{\sin^2(\omega\tau)}{\omega\tau} (-1)^n + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} \sin^2(\omega\tau) \\ &+ \frac{1 - (1 + (-1)^n) \cos \omega\tau + (-1)^n \cos^2(\omega\tau)}{\omega\tau} \\ &+ \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} (1 - 2(-1)^n \cos(\omega\tau) + \cos^2(\omega\tau)) = 0 \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \frac{(1 + (-1)^n)(1 - \cos(\omega\tau))}{\omega\tau} + \frac{n\pi a \omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} 2(1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) = 0$$

$$\Leftrightarrow a = -\frac{(1 + (-1)^n)(1 - \cos(\omega\tau))((\omega\tau)^2 - (n\pi)^2)}{2(\omega\tau)^2 n\pi (1 - (-1)^n \cos(\omega\tau))} \quad (2.15)$$

Für ungerade n und $\cos(\omega\tau) \neq -1$ gilt

$$a = 0, \quad (2.16)$$

für gerade $n \neq 0$ gilt

$$a = \frac{(n\pi)^2 - (\omega\tau)^2}{(\omega\tau)^2 n\pi}. \quad (2.17)$$

Mit

$$\frac{d^2 F(\omega\tau)}{da^2} \stackrel{(2.13)}{=} 2 \left[\frac{n\pi\omega\tau}{(\omega\tau)^2 - (n\pi)^2} \right]^2 2(1 - (-1)^n \cos(\omega\tau)) \geq 0 \quad (2.18)$$

und

$$\frac{d^2 F(\omega\tau)}{da^2} \geq 0 \stackrel{(2.5)}{\Rightarrow} \frac{d^2 \mathcal{E}}{da^2} \geq 0 \quad (\text{gilt, da } \frac{R(\omega)}{\omega} \geq 0) \quad (2.19)$$

folgt, dass \mathcal{E} für obige a ((2.16), (2.17)) minimal wird. Da $a = 0$ dem linearen Schalten entspricht und $F(\omega\tau)$ für diese Einstellung fast überall minimal ist, ist für ungerade n eine oszillierende Anregung energetisch ungünstiger, *weshalb wir im folgenden nur noch gerade n untersuchen*. Damit vereinfacht sich (2.9) zu:

$$F(x) = \left(\frac{1}{x} - \frac{n\pi a x}{(n\pi)^2 - x^2} \right)^2 2(1 - \cos(x)) \quad (2.20)$$

2.1.2 Diskussion von $F(x)$

Da die Funktion $F(x)$ nach (2.5) die einzige Veränderliche in der Anregungsenergie bei gegebenem System ist, soll diese hier in groben Zügen diskutiert werden. Es fällt auf, dass $F(x)$ zweimal nicht definiert ist. Hierzu bilden wir die Grenzwerte zu den Definitionslücken und erhalten

$$\lim_{x \rightarrow 0} F(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{2(1 - \cos(x))}{x^2} \stackrel{\text{L.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{2 \sin(x)}{2x} \stackrel{\text{L.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)}{1} = 1 \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow n\pi} F(x) &= \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2(1 - \cos(x))}{x^2} - 2 \frac{2(1 - \cos(x)) n\pi a x}{(n\pi)^2 - x^2} + \frac{2(1 - \cos(x)) (n\pi a x)^2}{((n\pi)^2 - x^2)^2} \\ &= \frac{(n\pi a)^2}{4} \end{aligned} \quad (2.22)$$

mit der Nebenrechnung (L.H.: Regel von L'Hopital)

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2(1 - \cos(x)) n\pi a x}{(n\pi)^2 - x^2} &\stackrel{\text{L.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2 \sin(x) n\pi a x + 2(1 - \cos(x)) n\pi a}{-2x} = 0 \\ \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2(1 - \cos(x)) (n\pi a x)^2}{((n\pi)^2 - x^2)^2} &\stackrel{\text{L.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2 \sin(x) (n\pi a x)^2 + 2(1 - \cos(x)) 2(n\pi a)^2 x}{2((n\pi)^2 - x^2)(-2x)} \\ \stackrel{\text{L.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow n\pi} \frac{2 \cos(x) (n\pi a x)^2 + 4 \sin(x) 2(n\pi a)^2 x + 2(1 - \cos(x)) 2(n\pi a)^2}{2((n\pi)^2 - x^2)(-2) + 2(-2x)^2} \\ &= \frac{2((n\pi)^2 a)^2}{8(n\pi)^2} = \frac{(n\pi a)^2}{4}. \end{aligned}$$

Da (2.21), (2.22) für $x \leq 0$ bzw. $n\pi$) wie für $x \geq 0$ bzw. $n\pi$) gelten, ist $F(x)$ hier stetig fortsetzbar. Wir sehen, dass:

- $F(x)$ stets größer Null ist,
- für $x = 0$ bei Eins anfängt,
- je schneller bei $x \approx 0$ abfällt, desto größer a ist,
- mit Periode 2π auf Null abfällt (Ausnahme $x = n\pi$),
- am Punkt $x = n\pi$ auf $\frac{(n\pi a)^2}{4}$ ansteigt und damit abhängig von a und n sehr groß wird und
- für $x \gg n\pi$ wegen seiner $\frac{1}{x^2}$ -Abhängigkeit stark abfällt,

was Abbildung 2.2 veranschaulicht.

Im Bereich $x = n\pi \pm 2\pi$ hat $F(x)$ auch sein globales Maximum (für große a, n), da der $2(1 - \cos(x))$ -Term 2π -periodisch ist und der quadratische Term hier seine einzige Polstelle (abgesehen von $x = 0$) besitzt.

Für die Parameter a und n gilt also kurz zusammengefasst:

- Je größer a wird, desto schneller fällt $F(x \approx 0)$ ab, desto größer wird $F(x)$ aber im restlichen Verlauf.
- Je größer n wird, desto langsamer fällt $F(x \approx 0)$ ab, desto länger bleibt $F(x)$ klein und desto größer wird aber $F(x \approx n\pi)$.

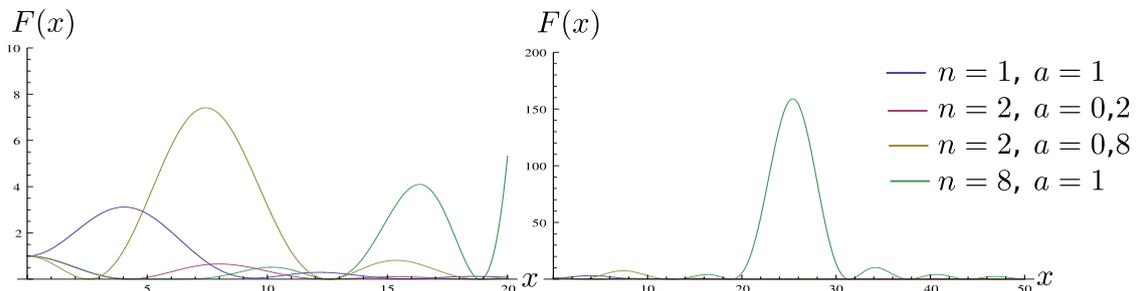


Abbildung 2.2: $F(x)$ für verschiedene a, n . Ungerade n sind energetisch ungünstig.

2.1.3 Bestimmung der optimalen Amplitude a

Wie in Abbildung 2.1 (links) zu sehen, hat die relevante Korrelationsfunktion des Hubbardmodells in unendlich vielen Dimensionen für $U = 0$ ein ausgeprägtes Maximum. Dieses sei an der Stelle $\omega = \Omega'$. Um nun die Anregungsenergie bzw. \mathcal{E} näherungsweise bezüglich a zu minimieren, wollen wir (nach (2.5)) die Parameter für $F(\omega\tau)$ so wählen, dass $F(\Omega'\tau)$ minimal wird. Da $F(\omega\tau) \geq 0$ setzen wir

$$F(\Omega'\tau) \Big|_{a=a_{\text{opt}}} = 0 \quad (2.23)$$

und lösen nach a_{opt} auf. Wir brauchen dabei nur den quadratischen Term in (2.20) zu betrachten, da wir auf $\Omega'\tau$ keinen Einfluss haben und damit $1 - \cos(\Omega'\tau) \neq 0$ annehmen können. Es ergibt sich

$$a_{\text{opt}} = \frac{(n\pi)^2 - (\Omega'\tau)^2}{n\pi(\Omega'\tau)^2} \quad (2.24)$$

$$\xrightarrow{n\pi \gg \Omega'\tau} \frac{n\pi}{(\Omega'\tau)^2}. \quad (2.25)$$

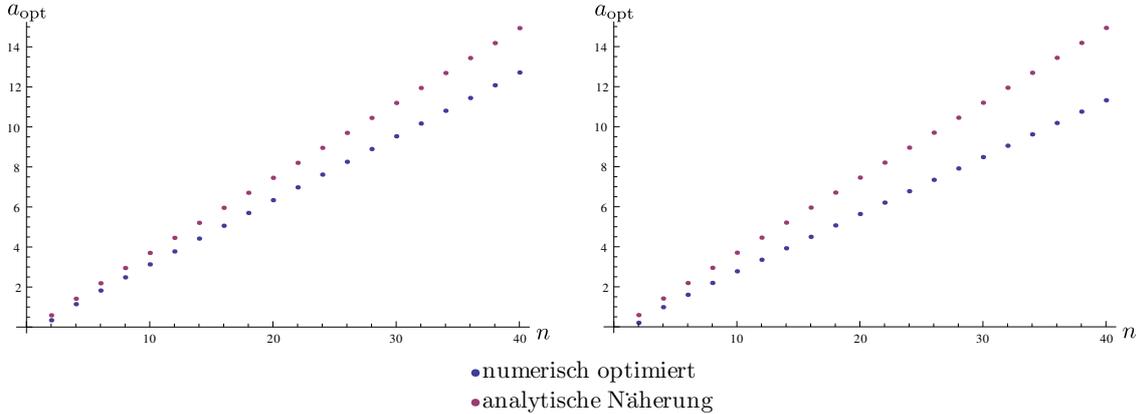


Abbildung 2.3: $a_{\text{opt}}(n)$ mit $\tau = 1, \Omega = 5,8$, links: $\nu = 3, c = 0,01$, rechts: $\nu = 1, c = 1$. Die analytische Näherung stimmt mit der numerischen Optimierung für schärfer gepeakte Korrelationsfunktionen (größeres ν ; links) besser überein.

Je ausgeprägter das Maximum der jeweiligen Funktion $\frac{R(\omega)}{\omega}$ ist, desto wirkungsvoller wird dieser Ansatz sein. Der größte Erfolg ließe sich im Falle einer Delta-Peak förmigen Korrelationsfunktion erzielen. Hier wäre $\Delta E = 0$.

Die Abweichung der analytisch optimierten Amplitude nach (2.24) von der numerisch optimierten Amplitude (für die die Anregungsenergie tatsächlich am niedrigsten ist) ist in Abhängigkeit von n in Abbildung 2.3 zu sehen. Die etwas kleinere numerisch optimierte Amplitude ist energetisch günstiger, da dadurch das Schaltspektrum $F(x)$ im Bereich $x \approx 0$ stärker gestaucht wird. Die analytische Näherung stimmt mit der numerischen Optimierung für ausgeprägter gepeakte Korrelationsfunktionen (größeres ν) besser überein.

2.1.4 Bestimmung der optimalen Oszillationszahl n

Wir setzen

$$\frac{d\mathcal{E}}{dn} = \int_0^\Omega d\omega \frac{R(\omega)}{\omega} \frac{dF(\omega\tau)}{dn} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.26)$$

Dies ist erfüllt für $n \rightarrow \infty$, da nach (2.20)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{dF(\omega\tau)}{dn} = \lim_{n \rightarrow \infty} 4(1 - \cos(\omega\tau)) \left[\frac{1}{\omega\tau} - \frac{n\pi a\omega\tau}{(n\pi)^2 - (\omega\tau)^2} \right] \frac{\pi a\omega\tau ((n\pi)^2 + (\omega\tau)^2)}{((n\pi)^2 - (\omega\tau)^2)^2} \quad (2.27)$$

$$= 0 \quad (2.28)$$

gilt. Ob es sich hierbei um ein Minimum handelt erfahren wir mit der zweiten Ableitung nach n :

$$\frac{d^2 F(\omega\tau)}{dn^2} = 4 \underbrace{(1 - \cos(\omega\tau))}_{\geq 0} \left\{ \underbrace{\left[\frac{\pi a \omega \tau ((n\pi)^2 + (\omega\tau)^2)}{((n\pi)^2 - (\omega\tau)^2)^2} \right]^2}_{\geq 0} + \underbrace{\left[\frac{1}{\omega\tau} - \frac{n\pi a \omega \tau}{(n\pi)^2 - (\omega\tau)^2} \right] \left[\frac{2n\pi^3 a \omega \tau}{((n\pi)^2 - (\omega\tau)^2)^3} (- (n\pi)^2 - 3(\omega\tau)^2) \right]}_{\text{sgn}[\] = -\text{sgn}(a), \text{ für } n \rightarrow \infty} \right\}. \quad (2.29)$$

Es genügt die höchste Potenz von n zu betrachten, um das Verhalten von \mathcal{E} für n geht gegen Unendlich zu bestimmen, womit analog zu (2.19) folgt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d^2 \mathcal{E}}{dn^2} \geq 0. \quad (2.30)$$

\mathcal{E} wird also minimal für $n \rightarrow \infty$ und wir erhalten

$$n_{\text{opt}}: \text{möglicht groß und gerade.} \quad (2.31)$$

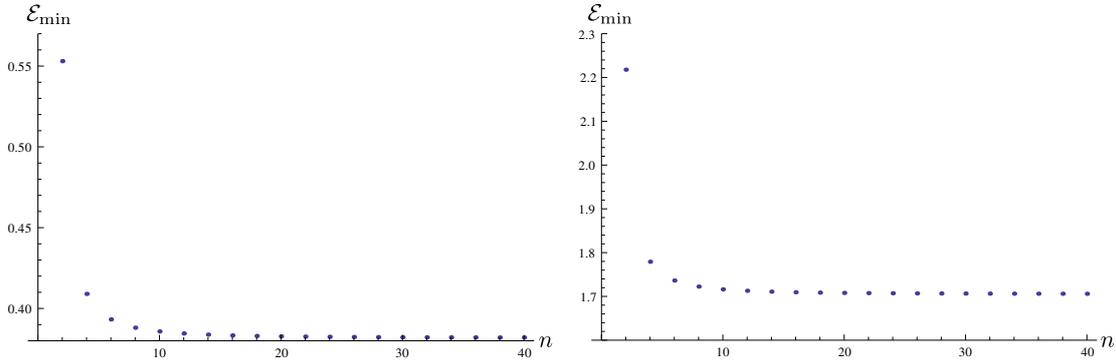


Abbildung 2.4: numerisch minimierte Anregungsenergie $\mathcal{E}_{\min}(n)$ mit $\tau = 1, \Omega = 5,8$, links: $\nu = 3, c = 0,01$, rechts: $\nu = 1, c = 1$. Die maximal mögliche Energieersparnis fällt exponentiell mit n ab.

Aus Abbildung 2.4 ist zu entnehmen, dass sich die Anregungsenergie nur im Bereich von kleinen n stark ändert. Für große n ist mit einer Erhöhung von n kaum mehr ein Vorteil zu erzielen.

2.1.5 Beschänkungen bei der Parameterwahl

Um die Anregungsenergie gering zu halten, sollten wir für unseren Schaltvorgang, also die Anzahl der Oszillationen n möglichst groß wählen. Die optimale Amplitude a_{opt} errechnet

sich nach (2.24). Wir sehen hierbei, dass a_{opt} auf Grund seiner Proportionalität zu n damit ebenfalls sehr groß wird. Dies könnte experimentell schwer zu realisieren sein, weshalb wir analog zu [3] die Einschränkung $0 \leq r(s) \leq 1$ treffen wollen.

Wir untersuchen dazu $0 \leq r(s)$ für s nahe Null, da hier der lineare Anteil von $r(s)$ noch klein ist wenn der oszillierende Anteil sein Minimum erreicht. Hierzu entwickeln wir $r(s)$ Taylor um $s = 0$, mit

$$\sin(n\pi s) = \sum_{z=0}^{\infty} (-1)^z \frac{(n\pi s)^{2z+1}}{(2z+1)!} \approx n\pi s \quad \text{für } |s| \ll 1,$$

wobei $0 \leq r(s)$ für $|s| \ll 1$ erfüllt ist, falls

$$0 \leq s + a(n\pi s) \quad (2.32)$$

$$\Leftrightarrow a \geq -\frac{1}{n\pi} \quad (2.33)$$

gilt. Eine weiter Taylorentwicklung um s nahe Eins für gerade n zum Sicherstellen von $r(s) \leq 1$ bringt uns leider nur (2.33), was an der Punktsymmetrie von $r(s)$ um $(1/2, 1/2)$ ¹ liegt. Um $r(s) \leq 1$ zu garantieren, müssen wir das höchste lokale Maximum von $r(s)$ abschätzen. Da uns das Standardverfahren² auf eine transzendente Ungleichung führt, müssen wir uns einer Abschätzung für die obere Grenze von a bedienen. Hierzu betrachten wir das letzte Maximum für *positive* a . Dieses liegt leicht rechts von $s = 1 - \frac{3}{2n}$. Das Maximum liegt nicht genau auf dieser Stelle, da der oszillierende Term hier zwar maximal ist, aber keine Steigung hat. Der lineare Term steigt hingegen mit der Steigung Eins. Die gesamte Funktion $r(s)$ hat also an dieser Stelle ebenfalls die Steigung Eins. Das Maximum sollte aber vor $s = 1 - \frac{1}{n}$ erreicht sein, da der oszillierende Teil hier steilstmöglich abfällt ($\frac{da \sin(n\pi s)}{ds} \propto \cos(n\pi s)$).

Anmerkung: Für den Fall, dass $r(s)$ bei $s = 1 - \frac{1}{n}$ sein Maximum noch nicht erreicht hat (also immer noch steigt) ist $r(s)$ auf dem ganzen Bereich $0 \leq s \leq 1$ steigend und die Bedingung $0 \leq r(s) \leq 1$ aufgrund der Randbedingungen $r(0) = 0, r(1) = 1$ automatisch erfüllt.

Hierauf bezieht sich die Abschätzung

$$r(s) \leq 1 - \frac{1}{n} + a \stackrel{!}{\leq} 1 \quad (2.34)$$

$$\Leftrightarrow a \leq \frac{1}{n}, \quad (2.35)$$

in der wir den maximalen Beitrag des Oszillationsterms mit dem größt möglichen s -Wert für das Maximum kombinieren. Wir erhalten aus (2.33), (2.35) also insgesamt die Beschränkung

$$-\frac{1}{n\pi} \leq a \leq \frac{1}{n} \quad (2.36)$$

die sicherstellt, dass $0 \leq r(s) \leq 1$ gilt.

Anmerkung: Für *ungerade* n , können wir die ober Grenze durch eine Taylorentwicklung um $s \approx 1$ erhalten, was uns zu

$$s - an\pi(s-1) \stackrel{!}{\leq} 1$$

führt und wir erhalten

$$|a| \leq \frac{1}{n\pi}. \quad (2.37)$$

Dieses Ergebnis wird in Kapitel 3 von Bedeutung sein.

¹Eine Verschiebung von $r(s)$ um $(-1/2, -1/2)$ führt uns zu $r(s)_{\text{verschoben}} = (s + \frac{1}{2}) + a \sin(n\pi(s + \frac{1}{2})) - \frac{1}{2} = s + a \sin(n\pi s)(-1)^{n/2} = -r(-s)_{\text{verschoben}}$, was einer Punktsymmetrie entspricht.

²Aus $\left. \frac{dr(s)}{ds} \right|_{s=s_{\min}} \stackrel{!}{=} 0$ folgt $s_{\min} \cdot r(s_{\min}) \stackrel{!}{\leq} 1$ führt dann zu einer transzendenten Ungleichung.

2.1.6 Wahl von n unter Beschränkungen

Um n nun aus der allgemeinen Beschränkung

$$\frac{C_1}{n} \leq a \leq \frac{C_2}{n} \quad (2.38)$$

zu bestimmen, setzen wir unsere errechnete optimale Amplitude (2.24) für a ein und lösen nach n auf:

$$\frac{C_1}{n} \leq \frac{(n\pi)^2 - (\Omega'\tau)^2}{n\pi(\Omega'\tau)^2} \leq \frac{C_2}{n} \quad (2.39)$$

$$\Leftrightarrow C_1\pi(\Omega'\tau)^2 \leq (n\pi)^2 - (\Omega'\tau)^2 \leq C_2\pi(\Omega'\tau)^2$$

$$\Leftrightarrow (C_1\pi + 1)(\Omega'\tau)^2 \leq (n\pi)^2 \leq (C_2\pi + 1)(\Omega'\tau)^2$$

$$\text{mit } (n\pi)^2 \geq 0 \Rightarrow \max \left\{ 0, \frac{C_1\pi + 1}{\sqrt{|C_1\pi + 1|}\pi} \Omega'\tau \right\} \leq n \leq \frac{\sqrt{C_2\pi + 1}}{\pi} \Omega'\tau. \quad (2.40)$$

Für n sollte also die größte gerade Zahl gewählt werden, die (2.40) erfüllt.

Anmerkung: Für die Beschränkung $0 \leq r(s) \leq 1$ aus Abschnitt 2.1.5 gilt $C_1 = -\frac{1}{\pi}$, $C_2 = 1$.

2.2 Schaltvorgänge der Form: $r(s) = us + v + a \sin(bs + d)$

Nun sollen die untersuchten oszillierenden Schaltvorgänge auf die Form $r(s) = us + v + a \sin(bs + d)$ verallgemeinert werden. Aus den Randbedingungen $r(0) = 0$ und $r(1) = 1$ ergibt sich

$$r(0) = v + a \sin(d) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow v = -a \sin(d) \quad (2.41)$$

$$r(1) = u + v + a \sin(b + c) \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow u = 1 + a (\sin(d) - \sin(b + d)) . \quad (2.42)$$

Hieraus folgt für den verallgemeinerten Schaltverlauf

$$r(s) = us + v + a \sin(bs + d) \quad (2.43)$$

$$= -a \sin(d) + s + a (\sin(d) - \sin(b + d)) s + a \sin(bs + d) . \quad (2.44)$$

2.2.1 Berechnung des Schaltspektrums $F(x)$

Wir berechnen nun

$$F(x) = \left| \int_0^1 ds \left(\frac{dr}{ds} \right) \exp(ixs) \right|^2 \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} &= \left| \int_0^1 ds (u + ab \cos(bs + d)) \exp(ixs) \right|^2 \\ &= \left| \frac{u}{ix} (\exp(ix) - 1) + \frac{ab}{2} \int_0^1 ds [\exp(i(x+b)s) \exp(id) + \exp(i(x-b)s) \exp(-id)] \right|^2 \\ &= \left| i \frac{u}{x} (1 - \exp(ix)) + \frac{ab}{2} \left[\frac{\exp(i(x+b)) - 1}{i(x+b)} \exp(id) + \frac{\exp(i(x-b)) - 1}{i(x-b)} \exp(-id) \right] \right|^2 \\ &= \left| u \frac{\sin(x)}{x} + iu \frac{1 - \cos(x)}{x} - i \frac{ab}{2} \left[\frac{\cos(x+b+d) + i \sin(x+b+d) - \cos(d) - i \sin(d)}{x+b} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\cos(x-b-d) + i \sin(x-b-d) - \cos(d) + i \sin(d)}{x-b} \right] \right|^2 \\ &= \left[u \frac{\sin(x)}{x} + \frac{ab}{2} \left(\frac{\sin(x+b+d) - \sin(d)}{x+b} + \frac{\sin(x-b-d) + \sin(d)}{x-b} \right) \right]^2 + \\ &\quad + \left[u \frac{1 - \cos(x)}{x} - \frac{ab}{2} \left(\frac{\cos(x+b+d) - \cos(d)}{x+b} + \frac{\cos(x-b-d) - \cos(d)}{x-b} \right) \right]^2 . \quad (2.46) \end{aligned}$$

2.2.2 Bestimmung der optimalen Amplitude a

Um die optimale Amplitude zu bestimmen, gehen wir analog zu Abschnitt 2.1.3 vor und setzen

$$F(\Omega'\tau) \Big|_{a=a_{\text{opt}}} \stackrel{!}{=} 0, \quad (2.47)$$

mit $\frac{R(\omega)}{\omega}$ maximal bei $\omega = \Omega'$.

Nach (2.46) müssen wir dazu die einzelnen quadratischen Terme gleich Null setzen und jeweils nach a auflösen. Somit erhalten wir a_1 bzw. a_2 zu

a_1 :

$$(1 + a_1 (\sin(d) - \sin(b+d))) \frac{\sin(\Omega'\tau)}{\Omega'\tau} + \frac{a_1 b}{2} \left(\frac{\sin(\Omega'\tau + b+d) - \sin(d)}{\Omega'\tau + b} + \frac{\sin(\Omega'\tau - b-d) + \sin(d)}{\Omega'\tau - b} \right) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= - \left\{ \sin(d) - \sin(b+d) \right. \\ &\quad \left. + \frac{b\Omega'\tau}{2\sin(\Omega'\tau)} \frac{\Omega'\tau (\sin(\Omega'\tau + b+d) + \sin(\Omega'\tau - b-d)) + b(\sin(\Omega'\tau - b-d) - \sin(\Omega'\tau + b+d)) + 2b\sin(d)}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \sin(b+d) - \sin(d) - \frac{b(\Omega'\tau)^2 \sin(\Omega'\tau) \cos(b+d) + b(\Omega'\tau)^2 \cos(\Omega'\tau) \sin(b+d)}{2\sin(\Omega'\tau) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{+b(\Omega'\tau)^2 \sin(\Omega'\tau) \cos(b+d) - b(\Omega'\tau)^2 \cos(\Omega'\tau) \sin(b+d) + b^2\Omega'\tau \sin(\Omega'\tau) \cos(b+d)}{2\sin(\Omega'\tau) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{-b^2\Omega'\tau \cos(\Omega'\tau) \sin(b+d) - b^2\Omega'\tau \sin(\Omega'\tau) \cos(b+d) - b^2\Omega'\tau \cos(\Omega'\tau) \sin(b+d) + 2b^2\Omega'\tau \sin(d)}{2\sin(\Omega'\tau) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \sin(b+d) - \sin(d) - \frac{b\Omega'\tau}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \left(\Omega'\tau \cos(b+d) - b \sin(b+d) \frac{\cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} + b \frac{\sin(d)}{\sin(\Omega'\tau)} \right) \right\}^{-1}, \quad (2.49) \end{aligned}$$

a_2 :

$$(1 + a_2 (\sin(d) - \sin(b+d))) \frac{1 - \cos(\Omega'\tau)}{\Omega'\tau} - \frac{a_2 b}{2} \left(\frac{\cos(\Omega'\tau + b+d) - \cos(d)}{\Omega'\tau + b} + \frac{\cos(\Omega'\tau - b-d) - \cos(d)}{\Omega'\tau - b} \right) \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \quad (2.50)$$

$$\begin{aligned} a_2 &= - \left\{ \sin(d) - \sin(b+d) - \frac{b\Omega'\tau}{2(1 - \cos(\Omega'\tau))} \left[\frac{\Omega'\tau (\cos(\Omega'\tau + b+d) + \cos(\Omega'\tau - b-d))}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{b(\cos(\Omega'\tau - b-d) - \cos(\Omega'\tau + b+d)) - 2\Omega'\tau \cos(d)}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \right] \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \sin(b+d) - \sin(d) + \frac{b(\Omega'\tau)^2 \cos(\Omega'\tau) \cos(b+d) - b(\Omega'\tau)^2 \sin(\Omega'\tau) \sin(b+d)}{2(1 - \cos(\Omega'\tau)) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{b(\Omega'\tau)^2 \cos(\Omega'\tau) \cos(b+d) + b(\Omega'\tau)^2 \sin(\Omega'\tau) \sin(b+d) + b^2\Omega'\tau \cos(\Omega'\tau) \cos(b+d) + b^2\Omega'\tau \sin(\Omega'\tau) \sin(b+d)}{2(1 - \cos(\Omega'\tau)) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{-b^2\Omega'\tau \cos(\Omega'\tau) \cos(b+d) + b^2\Omega'\tau \sin(\Omega'\tau) \sin(b+d) - 2b(\Omega'\tau)^2 \cos(d)}{2(1 - \cos(\Omega'\tau)) ((\Omega'\tau)^2 - b^2)} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \sin(b+d) - \sin(d) + \frac{b\Omega'\tau}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \frac{\Omega'\tau \cos(\Omega'\tau) \cos(b+d) + b \sin(\Omega'\tau) \sin(b+d) - \Omega'\tau \cos(d)}{1 - \cos(\Omega'\tau)} \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \sin(b+d) - \sin(d) - \frac{b\Omega'\tau}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \left[\Omega'\tau \cos(b+d) - b \sin(b+d) \frac{\cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\Omega'\tau (\cos(b+d) - \cos(d))}{1 - \cos(\Omega'\tau)} - \frac{b \sin(b+d)}{\sin(\Omega'\tau)} \right] \right\}^{-1}. \quad (2.51) \end{aligned}$$

Um (2.47) zu erfüllen, muss

$$a_1 = a_2 \quad (2.52)$$

$$\Leftrightarrow b \frac{\sin(b+d) + \sin(d)}{\sin(\Omega'\tau)} + \Omega'\tau \frac{\cos(b+d) - \cos(d)}{1 - \cos(\Omega'\tau)} = 0 \quad (2.53)$$

gelten. Um die transzendente Gleichung (2.53) zu lösen, versuchen wir d so zu wählen, dass die beiden Summanden gleich Null sind. Dies ist sinnvoll, da wir auf $\Omega'\tau$ keinen Einfluss haben und

b sowohl einzeln, als auch in den Argumenten der trigonometrischen Funktionen vorkommt. So erhalten wir die Bedingungen:

$$\left. \begin{aligned} l2\pi + b + d &= -d \\ l2\pi + b + d &= \pm d \end{aligned} \right\} \Rightarrow d_{\text{opt}} = -\frac{b}{2} + l\pi \quad \text{mit } l \in \{0,1\}. \quad (2.54)$$

Die triviale Lösung $b = 0$, die sich direkt aus (2.53) ergibt, führt uns auf einen linearen Einschaltvorgang und soll deshalb nicht weiter beachtet werden.

Eine alternative, numerische Möglichkeit (2.53) zu lösen besteht darin, die Parameter³ $0 \leq b \leq 10\pi$ und $0 \leq d \leq 2\pi$ unabhängig voneinander in kleiner Schrittweite zu steigern und immer als Wertepaar abzuspeichern, wenn

$$\left| b \frac{\sin(b+d) + \sin(d)}{\sin(\Omega'\tau)} + \Omega'\tau \frac{\cos(b+d) - \cos(d)}{1 - \cos(\Omega'\tau)} \right| \leq 10^{-7} \quad (2.55)$$

gilt. Geplottet sind diese Wertepaare in Abbildung 2.5. Hieraus lässt sich unser bereits bekanntes Ergebnis (2.54) raten und durch Einsetzen in (2.53) verifizieren.

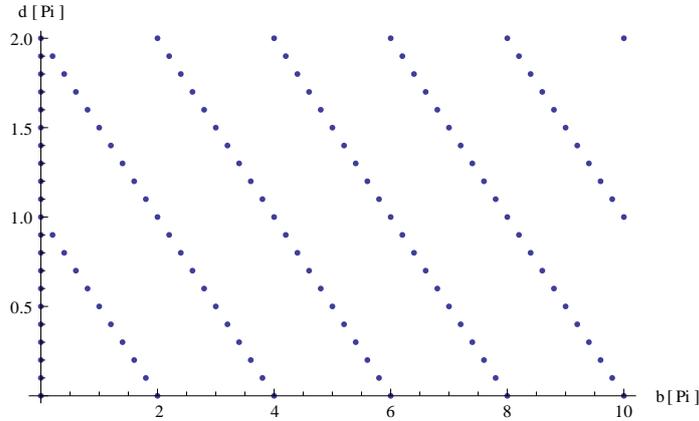


Abbildung 2.5: numerische Lösung von Gleichung (2.53); Schrittweite: $0,1\pi$, $\Omega'\tau = 4$.

Aus (2.49), (2.51) und (2.54) folgt für die optimale Amplitude

$$\begin{aligned} a_{\text{opt}} &= a_1 \Big|_{d_{\text{opt}}} = a_2 \Big|_{d_{\text{opt}}} \\ a_{\text{opt}} &= (-1)^l \left\{ 2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) - \frac{b\Omega'\tau}{(\Omega'\tau)^2 - b^2} \left[\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right] \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Weiter erhalten wir

$$\begin{aligned} F(x) \Big|_{d_{\text{opt}}} &= \left[\left((-1)^l - 2a \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \frac{\sin(x)}{x} + \frac{ab}{2} \left(\frac{\sin(x + \frac{b}{2}) + \sin(\frac{b}{2})}{x+b} + \frac{\sin(x - \frac{b}{2}) - \sin(\frac{b}{2})}{x-b} \right) \right]^2 \\ &+ \left[\left((-1)^l - 2a \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \frac{1 - \cos(x)}{x} - \frac{ab}{2} \left(\frac{\cos(x + \frac{b}{2}) - \cos(\frac{b}{2})}{x+b} + \frac{\cos(x - \frac{b}{2}) - \cos(\frac{b}{2})}{x-b} \right) \right]^2 \\ &= \left[\left((-1)^l - 2a \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \frac{\sin(x)}{x} + \frac{ab}{x^2 - b^2} \left(x \sin(x) \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b (\cos(x) + 1) \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \right]^2 \\ &+ \left[\left((-1)^l - 2a \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \frac{1 - \cos(x)}{x} - \frac{ab}{x^2 - b^2} \left(x (\cos(x) - 1) \cos\left(\frac{b}{2}\right) + b \sin(x) \sin\left(\frac{b}{2}\right) \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (2.57)$$

³Die obere Grenze von $b \leq 10\pi$ ist nur beispielhaft und soll zum einen den Bereich $[0, 2\pi]$ abdecken, sowie eine Veränderung für große b sichtbar machen.

2.2.3 Bestimmung der optimalen Oszillationsgeschwindigkeit b

Da wir im Vergleich zum linearen Schalten eine nicht zu vernachlässigende Energieersparnis erzielen wollen, beschränken wir uns in der Wahl von b auf $b \gg 0$, da $b \approx 0$ die Oszillation zerstören würde. Um nun das optimale b zu bestimmen, versuchen wir $F(x)$ in (2.57) zu minimieren. Die beiden quadratischen Terme gliedern sich jeweils in zwei Summanden. Der erste Summand lässt sich durch eine geeignete Wahl vom $\sin\left(\frac{b}{2}\right)$ minimieren. Der zweite Summand hat eine Polstelle bei $x = b$. Da $b \gg 0$ gelten muss und wir die Nähe der Polstelle meiden wollen, können wir diesen minimieren, indem wir b möglichst groß wählen. Das führt uns zu den Abschätzungen

$$b \gg \Omega\tau \geq x \quad \Rightarrow \quad (2.58)$$

$$a_{\text{opt}} = (-1)^l \left[2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) + \frac{\Omega'\tau}{b} \left(\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right) \right]^{-1} \quad (2.59)$$

und

$$\begin{aligned} F(x) \Big|_{\substack{a_{\text{opt}} \\ d_{\text{opt}}}} &= \left[(-1)^l \frac{\sin(x)}{x} + (-1)^l \frac{-2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{\sin(x)}{x} - \frac{x}{b} \sin(x) \cos\left(\frac{b}{2}\right) + (\cos(x) + 1) \sin\left(\frac{b}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) + \frac{\Omega'\tau}{b} \left(\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right)} \right]^2 \\ &+ \left[(-1)^l \frac{1 - \cos(x)}{x} + (-1)^l \frac{-2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 - \cos(x)}{x} + \frac{x}{b} (\cos(x) - 1) \cos\left(\frac{b}{2}\right) + \sin(x) \sin\left(\frac{b}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) + \frac{\Omega'\tau}{b} \left(\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right)} \right]^2 \\ &= \left[\underbrace{\frac{\sin(x)}{x}}_{\text{Term1}} + \underbrace{\frac{-2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{\sin(x)}{x} + (\cos(x) + 1) \sin\left(\frac{b}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) + \frac{\Omega'\tau}{b} \left(\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right)}}_{\text{Term2}} \right]^2 \\ &+ \left[\underbrace{\frac{1 - \cos(x)}{x}}_{\text{Term3}} + \underbrace{\frac{-2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 - \cos(x)}{x} + \sin(x) \sin\left(\frac{b}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{b}{2}\right) + \frac{\Omega'\tau}{b} \left(\Omega'\tau \cos\left(\frac{b}{2}\right) - b \sin\left(\frac{b}{2}\right) \frac{1 + \cos(\Omega'\tau)}{\sin(\Omega'\tau)} \right)}}_{\text{Term4}} \right]^2, \quad (2.60) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \text{Term1} &\rightarrow \begin{cases} 1 \text{ für } x \rightarrow 0 \\ 0 \text{ für } x \rightarrow \infty \end{cases} \\ \text{Term2} &\rightarrow \begin{cases} 0 \text{ für } x \rightarrow 0 \\ 0 \text{ für } x \rightarrow \infty \end{cases} \\ \text{Term3} &\rightarrow \begin{cases} 0 \text{ für } x \rightarrow 0 \\ 0 \text{ für } x \rightarrow \infty \end{cases} \\ \text{Term4} &\rightarrow \begin{cases} 0 \text{ für } x \rightarrow 0 \\ 0 \text{ für } x \rightarrow \infty \end{cases} . \end{aligned}$$

Wir sehen, dass wir Term 2 nicht dazu gebrauchen können um Term 1 auszugleichen, da Term 1 nur nahe $x = 0$ einen Beitrag liefert und Term 2 hier verschwindet. Term 3 liefert in keinem der beiden Grenzfälle einen Beitrag und muss deshalb auch nicht ausgeglichen werden. Den

Beitrag für $x \approx \pi$ nehmen wir als vernachlässigbar an. Wir werden $F(x) \Big|_{a_{\text{opt}}}^{d_{\text{opt}}}$ also am besten minimieren, indem wir Term 2 und Term 4 verschwinden lassen. Sowohl Term 2 als auch Term 4 sind proportional zu $\sin\left(\frac{b}{2}\right)$ woraus das optimale b in (2.61) folgt.

2.2.4 Die optimale Parameterwahl für den verallgemeinerten Schaltverlauf

Im vorherigen Absatz haben wir hergeleitet, dass

$$b_{\text{opt}} = n\pi \quad \text{mit } n: \text{ gerade und möglichst groß} \quad (\text{vergleiche: (2.31)}) \quad (2.61)$$

sein soll. Die Bedingung "n möglichst groß" ergibt sich hierbei aus der Voraussetzung (2.58). Wie wir Gleichung (2.60) entnehmen können, ist das Schaltspektrum mit optimaler Amplitude a_{opt} und Phase d_{opt} unabhängig von l . Dies liegt daran, dass $l = 1$ sowohl ein $+\pi$ im Argument des Sinus unseres Schalverlaufs hinzufügt, als auch das Vorzeichen der Amplitude ändert, was sich gegenseitig ausgleicht. Deshalb setzten wir

$$d_{\text{opt}} = 0 \quad (\text{äquivalent zum Schaltvorgang aus Abschnitt 2.1}). \quad (2.62)$$

Aus (2.54) und der Tatsache, dass d nur in den Argumenten von trigonometrischen Funktionen auftritt ($d \Leftrightarrow d + 2\pi$) folgt für

$$l_{\text{opt}} = \begin{cases} 0 & \text{für } \frac{n}{2} : \text{ gerade} \\ 1 & \text{für } \frac{n}{2} : \text{ ungerade} \end{cases} \quad (2.63)$$

Für die optimale Amplitude ergibt sich aus $\sin\left(\frac{b}{2}\right) = 0$, $\cos\left(\frac{b}{2}\right) = (-1)^l$ und (2.56)

$$a_{\text{opt}} = \frac{(n\pi)^2 - (\Omega'\tau)^2}{n\pi(\Omega'\tau)^2} \quad (\text{vergleiche: (2.24)}). \quad (2.64)$$

Aus (2.57) folgt damit für

$$F_{\text{opt}} = \left(\frac{1}{x} - \frac{n\pi a_{\text{opt}} x}{(n\pi)^2 - x^2} \right)^2 2(1 - \cos(x)) \quad (\text{vergleiche: (2.20)}). \quad (2.65)$$

Wir sehen also, dass genau die von uns in Abschnitt 2.1 untersuchten Schaltverläufe zur niedrigsten Anregungsenergie führen und eine Verallgemeinerung keinen Vorteil bringt. In Abschnitt 2.3 werden wir uns daher auf $r(s) = s + a \sin(n\pi s)$ beschränken.

Zur Verdeutlichung ist Abbildung 2.6 die Anregungsenergie \mathcal{E} in Abhängigkeit von a und b dargestellt. Wir sehen deutlich, dass diese für geradzahlige b/π und für eine betragsmäßig mit b steigende Amplitude am geringsten ist. Bei $b = 2\pi$ ist die optimale Amplitude noch sehr gering, was das fehlende Zackenmuster an dieser Stelle erklärt. Der Vorzeichenwechsel für die Amplitude mit der geringsten Anregungsenergie kommt dadurch zustande, dass hier noch nicht $d = 0$ sondern $d = d_{\text{opt}} = -\frac{b}{2}$ gewählt ist, um d für alle b optimal zu wählen.

Eine niedriger als erwartete Anregungsenergie tritt bei $b \approx 3,9\pi$ auf. Hier ist der günstige (schwarze) Bereich größer als bei den benachbarten Minima und bei Betrachtung in dreidimensionaler Darstellung sieht man, dass die Anregungsenergie hier niedriger ist. Da (2.58) hier nicht erfüllt ist, gilt hier nicht zwangsläufig (2.61), was zu dieser Ausnahme führt. Die

Amplitude an dieser Stelle entspricht in etwa der nach (2.59) erwarteten optimalen Amplitude von $a_{\text{opt}} = 2,4$. Die Übereinstimmung ist dabei umso besser, je größer ν ist. Allerdings ist die Anregungsenergie an dieser Stelle nur etwas geringer als bei den von uns bestimmten Minima, so dass sich dadurch keinen nennenswerter Vorteil erzielen lässt. Wir sehen also, dass unsere verwendeten Näherungen nicht alle Fälle berücksichtigen, wir aber die Anregungsenergie damit qualitativ gut beschreiben können.

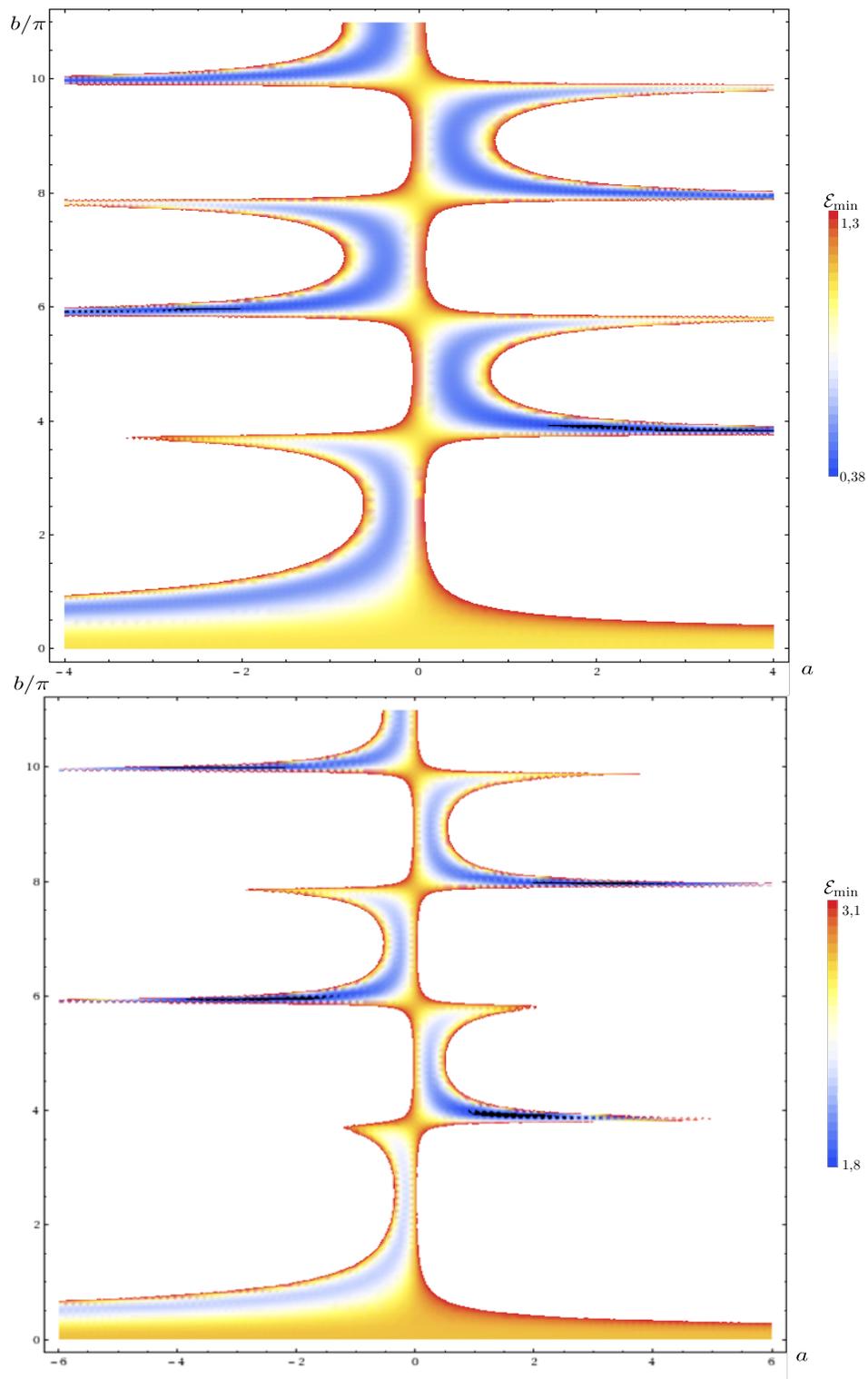


Abbildung 2.6: \mathcal{E}_{\min} in Abhängigkeit von a, b mit $\Omega = 5,8, \tau = 1, d = -b/2$, oben: $\nu = 3, c = 0,01$, unten: $\nu = 1, c = 1$. Deutliche Minima sind bei b/π geradzahlig und abwechselndem Vorzeichen von a zu erkennen. Weiße Flächen haben ein größeres \mathcal{E}_{\min} , schwarze Flächen ein kleineres, als die Skala darstellen kann. Schwarze Flächen sind damit energetisch besonders günstig.

2.3 Vergleich der Ergebnisse

In Abschnitt 2.1.3 wurde beschrieben, dass uns das oszillierende Schalten in die Lage versetzt, über eine geeignete Amplitudenwahl ein Minimum des Schaltspektrums $F(\omega\tau)$ genau am Maximum der Korrelationsfunktion $\frac{R(\omega)}{\omega}$ zu positionieren. Die Anregungsenergie, als das Integral über das Produkt der beiden, wird dadurch geringer. In diesem Abschnitt soll nun die mögliche Energieersparnis in Hinblick auf verschiedene Schaltzeiten diskutiert werden.

2.3.1 Korrelationsfunktionen für die verschiedenen Einschaltvorgänge

Wie bereits in Abschnitt 2.1 (Gleichungen (2.20),(2.24)) angegeben, bzw. für den weichen Schaltverlauf selbst herzuleiten (vgl. auch [2]), folgen nach (2.6) für die Einschaltvorgänge

$$r_{\text{lin}}(s) = s, \quad (2.66)$$

$$r_{\text{osz}}(s) = s + a_{\text{opt}} \sin(n\pi s), \quad (2.67)$$

$$r_{\text{weich}}(s) = \frac{1 - \cos(\pi s)}{2} \quad (2.68)$$

die Schaltspektren (Grafik siehe Abbildung 2.7)

$$F_{\text{lin}}(x) = 2 \frac{1 - \cos(x)}{x^2}, \quad (2.69)$$

$$F_{\text{osz}}(x) = \left[1 - \frac{(n\pi)^2 - (\Omega'\tau)^2}{(n\pi)^2 - x^2} \left(\frac{x}{\Omega'\tau} \right)^2 \right]^2 2 \frac{1 - \cos(x)}{x^2}, \quad (2.70)$$

$$F_{\text{weich}}(x) = \frac{\pi^4}{2} \frac{1 + \cos(x)}{(\pi^2 - x^2)^2}. \quad (2.71)$$

Anmerkung: Das Schaltspektrum F_{weich} nach Gleichung (2.71) weicht von dem in [2] angegebenen aufgrund eines Druckfehlers ab.

Der weiche Schaltverlauf hat dabei seinen ersten Knick in der zweiten Ableitung ($r''_{\text{weich}}(1) = -\frac{\pi^2}{2} \neq 0$) und ist damit weich für $\nu \leq 3$ [2].

2.3.2 Diskussion der Anregungsenergie für die verschiedenen Einschaltvorgänge

Die Schaltzeit τ streckt ($\tau \leq 1$) oder staucht ($\tau \geq 1$) das Schaltspektrum. Wie wir dem Verlauf der verschiedenen Schaltspektren entnehmen können, erwarten wir für kleine Schaltzeiten (τ): $\mathcal{E}_{\text{osz}} \leq \mathcal{E}_{\text{lin}} \leq \mathcal{E}_{\text{weich}}$, da hier nur $F(\omega\tau)$ in der Nähe von $\omega\tau = 0$ wichtig ist.

Für große τ erwarten wir: $\mathcal{E}_{\text{weich}} \leq \mathcal{E}_{\text{lin}} \leq \mathcal{E}_{\text{osz}}$, da hier hauptsächlich die Gesamtfläche unter den Schaltspektren wichtig ist. Was für τ zwischen diesen beiden Grenzfällen gilt, wird von der Korrelationsfunktion abhängen. Je größer hierbei die Oszillationszahl n ist, desto deutlicher wird sich der oszillierende Schaltvorgang vom linearen unterscheiden.

Um konkrete Aussagen über die Anregungsenergie zu erhalten, vergleichen wir die Schaltspektren. Dem grafischen Verlauf der Schaltspektren in Abbildung 2.7 ist zu entnehmen, dass

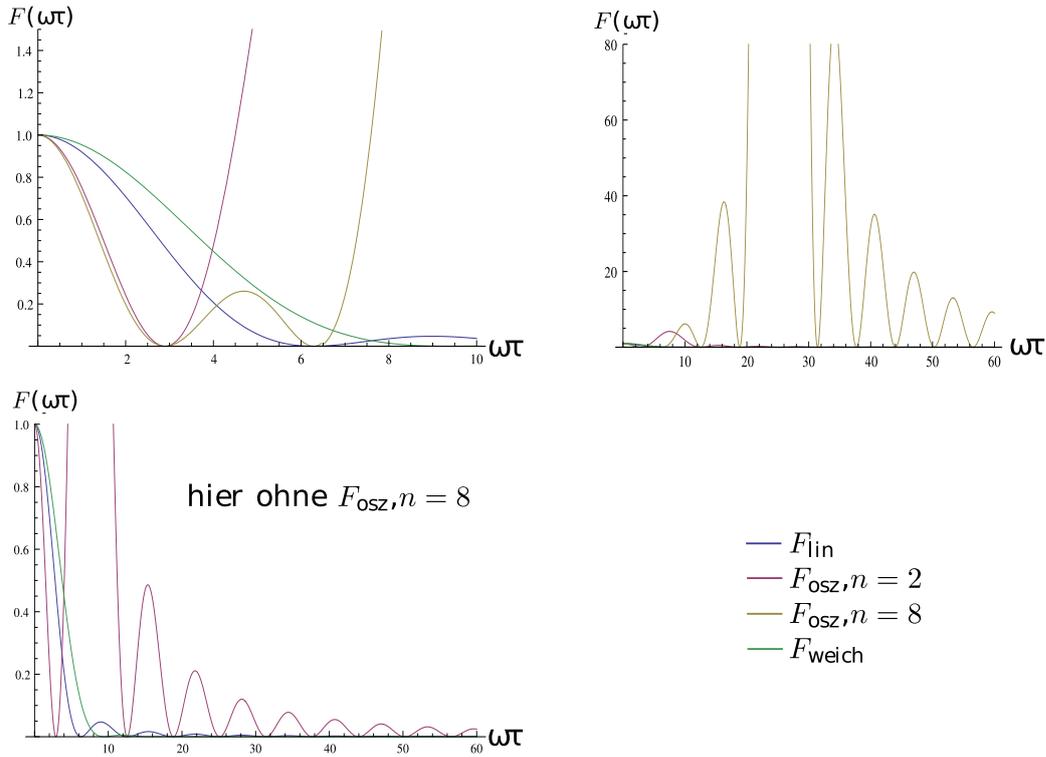


Abbildung 2.7: Schaltspektren für verschiedene Schaltvorgänge im Zoom und im Überblick.
 $\Omega'\tau = 2,9$

$F_{\text{osz}} \leq F_{\text{lin}}$ für $\omega\tau \approx 0$. Da nach Abschnitt 2.1.2 $F(\omega\tau)$ an der Stelle $\omega\tau \approx n\pi$ ihr globales Maximum hat, muss anschaulicherweise $\omega\tau \ll n\pi \forall \omega$ gelten, was uns zur Voraussetzung

$$n\pi \gg \Omega\tau \geq \omega\tau \quad (2.72)$$

führt. Durch Gleichsetzen von (2.70) mit (2.69) und dieser Voraussetzung erhalten wir mit $x = \omega\tau$:

$$\begin{aligned} \left(1 - \left(\frac{\omega\tau}{\Omega'\tau}\right)\right)^2 2 \frac{1 - \cos(\omega\tau)}{(\omega\tau)^2} &\stackrel{!}{\leq} 2 \frac{1 - \cos(\omega\tau)}{(\omega\tau)^2} \\ \Rightarrow \left|\frac{\omega\tau}{\Omega'\tau}\right| &\leq \sqrt{2}. \end{aligned}$$

Mit $0 \leq \omega \leq \Omega$ folgt

$$\tau \ll \frac{\pi}{\Omega} n \quad \wedge \quad \Omega' \geq \frac{\Omega}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{E}_{\text{osz}} \leq \mathcal{E}_{\text{lin}}. \quad (2.73)$$

Diese Beziehung zwischen Ω und Ω' scheint im Widerspruch zu Abschnitt 2.1.3 zu stehen. Die neue Position der Nullstellen von $F(\omega\tau)$ sorgt aber dafür, dass das globale Maximum von $F(\omega\tau)$, wenn es die Bandbreite betritt, schwächer gewichtet wird. In diesem Bereich ($n\pi \approx \Omega\tau$) und für schwach gepeakte Korrelationsfunktionen wird $\Omega' = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}$ die bessere Wahl sein. Für stark gepeakte Korrelationsfunktionen wird es hingegen besser sein, Ω' an das Maximum von $\frac{R(\omega)}{\omega}$ zu legen, auch wenn hier die Vorhersage für welche τ das oszillierende besser als das lineare Schalten ist, nicht so klar getroffen werden kann. Es ist hier allerdings zu beachten, dass die Wahl von Ω' keinen Einfluss auf unsere nach (2.8) modellierte Korrelationsfunktion sondern nur auf die optimale Amplitude hat.

Der Verlauf der Anregungsenergie in Abhängigkeit von τ für die verschiedenen Einschaltvorgänge ist in den Abbildungen 2.8 und 2.9 zu sehen.

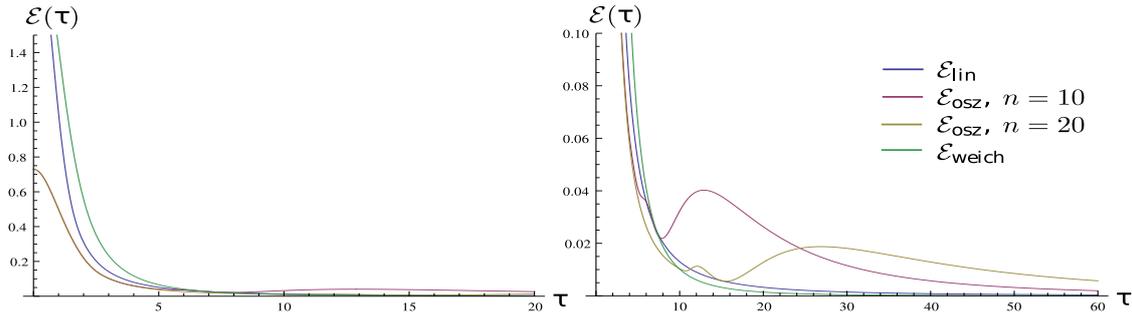


Abbildung 2.8: $\mathcal{E}(\tau)$ mit $\Omega = 5,8, \Omega' = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}, a = a_{\text{opt}}, c = 0,01, \nu = 3$. Der Anstieg der Anregungsenergie im oszillierenden Fall entsteht durch die große Fläche im Bereich des globalen Maximums des Schaltspektrums, welche in die Nähe des Maximums der Korrelationsfunktion rückt.

Abbildung 2.8 veranschaulicht, dass größere n größeren τ ermöglichen, für die das oszillierende Schalten zu weniger Anregung führt als das lineare Schalten. Die Abschätzung (2.73) ist hier deutlich erfüllt.

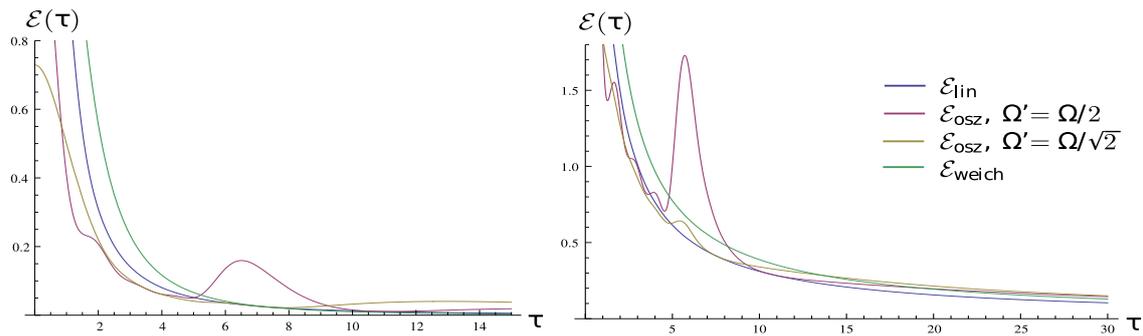


Abbildung 2.9: $\mathcal{E}(\tau)$ mit $\Omega = 5,8, a = a_{\text{opt}}$, Oszillation: $n = 10$; links: $c = 0,01, \nu = 3$; rechts: $c = 1, \nu = 1$. Dass \mathcal{E}_{osz} mit $\Omega' = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}$ bei $\tau \approx 0$ wie links zu sehen deutlich kleiner als die anderen \mathcal{E} ist, liegt an Beziehung (2.25) nach der die optimale Amplitude sehr groß wird. Das Schaltspektrum fällt damit im Bereich $\omega\tau \approx 0$ sehr schnell ab. Dies ist aufgrund der Streckung der einzig relevante Bereich für die Anregungsenergie. Dieser Effekt sollte aber aufgrund der schwer zu realisierenden großen Amplitude nicht praxisrelevant sein.

In Abbildung 2.9 können wir sehen, dass die Energieersparnis beim oszillierenden Schalten um so deutlicher ist, desto schärfer unsere Korrelationsfunktion gepeakt ist. Weiter sehen wir, dass unser neu gewähltes $\Omega' = \Omega/\sqrt{2}$ für kleine τ und eine schwach gepeakte Korrelationsfunktion ($\nu = 1$) vorteilhaft ist, für schärfer gepeakte Korrelationsfunktionen kann allerdings auch die andere Wahl für Ω' : $\frac{R(\Omega')}{\Omega'} \geq \frac{R(\omega)}{\omega} \forall \omega \in [0, \Omega]$ vorteilhaft sein. Bei größeren τ ist die Betrachtung hinfällig, da hier der leichter realisierbare lineare Schaltvorgang besser als der oszillierende ist. Die Abschätzung (2.73) mit $\tau \ll \frac{n\pi}{\Omega} \approx 5,4$ ist ebenfalls erfüllt.

2.3.3 Vergleich des analytisch optimierten Schaltverlaufs mit dem numerisch optimierten aus der Literatur

Wir wollen nun die numerischen Ergebnisse aus [3] für störungstheoretisch beschreibbare Einschaltvorgänge betrachten und mit unseren Ergebnissen vergleichen. Aufgrund der vorgegebenen Korrelationsfunktion, wie sie in Abbildung 2.1 zu sehen ist, erhalten wir die Parameter

$$\Omega = 8 \text{ und } \Omega' = 2,9. \quad (2.74)$$

Wir entscheiden uns aufgrund des ausgeprägten Peaks dieser Korrelationsfunktionen dafür, Ω' an deren Maximum zu legen und nicht nach $\Omega' = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}$. Nun wollen wir die optimalen Schaltverläufe für die Schaltzeiten: $\tau_1 = 1,25; \tau_2 = 2,25; \tau_3 = 3,25; \tau_4 = 4,25$ berechnen. Da (2.72) erfüllt sein muss, erhalten wir $n \gg \Omega \frac{\tau}{\pi} = 8 \frac{\tau}{\pi}$. Es soll aber ebenfalls die Einschränkung $0 \leq r(s) \leq 1$ für $s \in [0,1]$ (welche in [3] ebenfalls gilt) gelten. Dies führt uns nach (2.40) mit $C_2 = 1$ auf eine obere Grenze von $n < \frac{\sqrt{\pi+1}}{\pi} \Omega' \tau \approx 5,9 \frac{\tau}{\pi}$, was im Widerspruch zu obiger Bedingung für n steht. Betrachten wir allerdings die numerisch optimierten Schaltvorgänge aus [3] (siehe Abbildung 2.10), so sehen wir, dass diese an den beiden Grenzen $r(s) < 0$ und $r(s) > 1$ wie abgeschnitten wirken. Deshalb überschreiten wir diese Grenzen ein wenig und wählen für n eine gerade Zahl möglichst niedrig überhalb von $\frac{\Omega}{\pi} \tau$, um die Abweichung gering zu halten. Es sollte aber dennoch

$$n \gtrsim 1,1 \frac{\Omega}{\pi} \tau \quad (2.75)$$

gelten, womit folgt:

$$\begin{aligned} n_{1,25} &\gtrsim 3,5 \Rightarrow n_{1,25} = 4, \\ n_{2,25} &\gtrsim 6,3 \Rightarrow n_{1,25} = 8, \\ n_{3,25} &\gtrsim 9,1 \Rightarrow n_{1,25} = 10, \\ n_{4,25} &\gtrsim 11,9 \Rightarrow n_{1,25} = 12. \end{aligned}$$

Nach (2.24) ergibt sich für die optimalen Einschaltverläufe $r_\tau(s)$:

$$\begin{aligned} r_{1,25}(s) &= s + 0,88 \sin(4\pi s), \\ r_{2,25}(s) &= s + 0,55 \sin(8\pi s), \\ r_{3,25}(s) &= s + 0,32 \sin(10\pi s), \\ r_{4,25}(s) &= s + 0,22 \sin(12\pi s). \end{aligned}$$

Diese sind in Abbildung 2.10 (links) dargestellt. Wir sehen eine gute Übereinstimmung zwischen unseren vorhergesagten optimalen Schaltverläufen mit den numerisch optimierten nach [3]. Die leichten Abweichungen in der Amplitude kommen von den Beiträgen des Schaltspektrums bei $F(\omega\tau \approx 0)$ sowie $F(\omega\tau \approx \Omega\tau)$

In [3] wurde weiter der Zusammenhang $\omega_0 = 2\pi n_{\text{osz}}/\tau \approx 9 - 10$ für die Oszillationsfrequenz ω_0 festgestellt. Dies können wir bestätigen, indem wir (2.75) umstellen und mit der Oszillationsanzahl $n_{\text{osz}} = 2n$

$$2\pi n_{\text{osz}}/\tau \gtrsim 1,1\Omega \approx 8,8 \quad (2.76)$$

erhalten. Diese konstante Oszillationsfrequenz für den optimalen Einschaltvorgang liegt damit an der Einschränkung $0 \leq r(s) \leq 1$ und ist keine grundlegende Eigenschaft des betrachteten Systems.

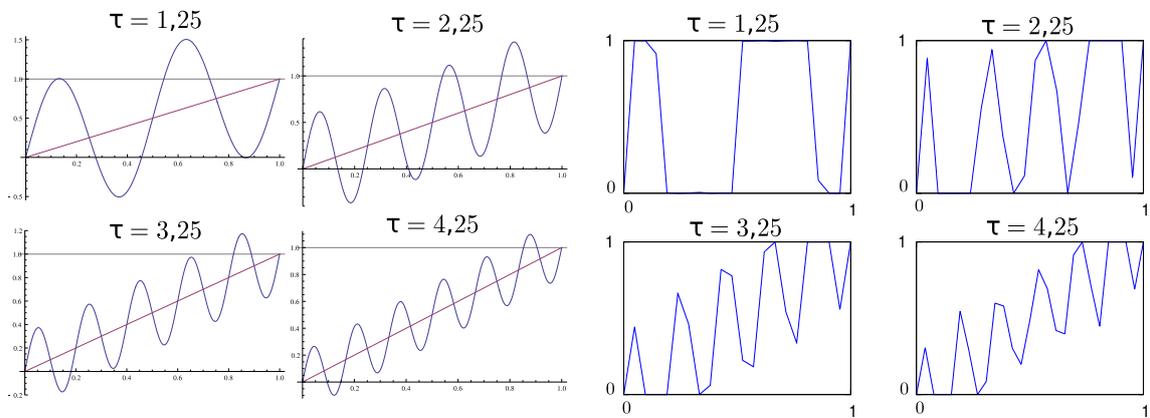


Abbildung 2.10: $r(s)$ für verschiedene τ . Vergleich unserer vorhergesagten optimalen Schaltverläufe (links) mit den numerisch optimierten (20 Stützstellen) nach [3] (rechts).

3 Oszillatorisches Schalten durch einen quantenkritischen Punkt

Bei einem Quantenphasenübergang ändert ein System sprunghaft seinen Zustand, wenn ein äußerer Parameter eine gewisse Schwelle, den quantenkritischen Punkt, überschreitet. Wir betrachten hier eine Parameteränderung der Form, wie wir sie in Abschnitt 2.1 untersucht haben, da sich diese in Kapitel 2 als die energetisch günstigste herausgestellt hat. Der quantenkritische Punkt, sei in unserem Hamiltonian

$$H(t) = H_0 + \kappa(t/\tau_R)W, \quad (3.1)$$

$$\kappa(s) = \Delta\kappa r(s) + \kappa_c, \quad (3.2)$$

$$r(s) = \begin{cases} -1 & \text{für } s \leq -1 \\ s + a \sin(\pi ms) & \text{für } -1 < s < 1 \\ 1 & \text{für } s \geq 1 \end{cases} \quad (3.3)$$

an der Stelle $s := \frac{t}{\tau_R} = 0$.

3.1 Kibble-Zurek-Mechanismus (KZM)

Der Grundgedanke des KZM stammt ursprünglich aus der Kosmologie von Kibble [5]. Zurek griff dieses Konzept auf, um Phasenübergänge zweiter Ordnung in supraflüssigem Helium zu beschreiben [10]. Das Prinzip des KZM für einen Phasenübergang zweiter Ordnung [1] besteht aus folgender Überlegung. Der äußeren Parameter κ erreiche den Quantenphasenübergang bei κ_c . Die relative Distanz zum quantenkritischen Punkt ist der dimensionslosen Parameter

$$\epsilon(s) = \frac{\kappa(s) - \kappa_c}{\kappa_c} = r(s) \frac{\Delta\kappa}{\kappa_c}. \quad (3.4)$$

Dieser Parameter bestimmt nun als weitere Größen des KZM, die Korrelationslänge

$$\xi \propto |\epsilon|^{-\nu} \quad (3.5)$$

und die Reaktionszeit:

$$\tau_{\text{react}} \propto |\epsilon|^{-\nu z} \simeq \Delta^{-1}, \quad (3.6)$$

welche durch die inverse Bandlücke festgelegt ist. Die Parameter ν, z sind hierbei systemabhängig. Die Reaktionszeit ist dabei ein Maß dafür, wie schnell das System einer Änderung von außen folgen kann, divergiert Nahe $\epsilon = 0$ und wird für große $|\epsilon|$ klein.

Ein Maß dafür, wie schnell sich der Anregungsparameter ändert, ist die Übergangsrate $|\frac{\dot{\epsilon}}{\epsilon}|$. Die inverse Übergangsrate $|\frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}}|$ ist damit eine zeitliche Größe.

Wenn nun die Reaktionszeit kleiner als die inverse Übergangsrate ist, kann das System näherungsweise der Anregung von außen adiabatisch folgen. Sobald die Reaktionszeit aber größer der inversen Übergangsrate ist, friert das System instantan ein und ändert sich erst wieder

(taut auf), wenn die Reaktionszeit kleiner als die inverse Übergangsrate¹ geworden ist. An diesem Punkt, der mit einem Dach über allen physikalischen Größen gekennzeichnet wird, ist der Erwartungswert eines Operators proportional zu einer Potenz der Korrelationslänge. So gilt beispielhaft für die Dichte der Anregungsenergie des Systems bei zulässiger Quasipartikelanregung in der Phase jenseits des Phasenübergangs

$$n_{\text{ex}} \propto \Delta E \propto \hat{\xi}^{-d} \propto |\dot{\epsilon}|^{\nu d}, \quad (3.7)$$

wobei d für die Anzahl der räumlichen Dimensionen steht [7].

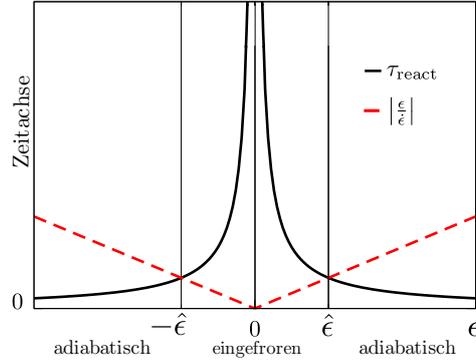


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Reaktionszeit τ_{react} und der inversen Übergangsrate $|\frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}}|$ für einen linearen Schaltvorgang (aus [1]); ν, z nicht weiter spezifiziert.

Der KZM stellt zwar eine Näherung dar, kann aber experimentell sowie theoretisch für einige Systeme bestätigt werden [7].

3.2 Bestimmung des Auftaupunkts \hat{s}

Für die Reaktionszeit gilt nur die Proportionalitätsbeziehung (3.6), weshalb wir die Proportionalitätskonstante τ_0 einführen, was die Reaktionszeit mit (3.4) zu

$$\tau_{\text{react}} = \tau_0 |r(s)|^{-\nu z} = \tau_0 |s + a \sin(\pi m s)|^{-\nu z} \quad (3.8)$$

vereinfacht. Die inverse Übergangsrate ist im Falle des oszillierenden Schaltens

$$\left| \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} \right| = \left| \frac{s + a \sin(\pi m s)}{1 + a \pi m \cos(\pi m s)} \tau_{\text{R}} \right|. \quad (3.9)$$

Wir sehen hier, dass sowohl Reaktionszeit als auch inverse Übergangsrate symmetrisch bezüglich s sind. Es reicht damit, dass wir uns in unserer Betrachtung auf $0 \leq s \leq 1$ beschränken. Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben setzen wir nun Reaktionszeit und inverse Übergangsrate gleich, was uns zu

$$\left| \frac{\hat{\epsilon}}{\dot{\hat{\epsilon}}} \right| = \left| \frac{\hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s})}{1 + a \pi m \cos(\pi m \hat{s})} \tau_{\text{R}} \right| \stackrel{!}{=} \tau_0 |\hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s})|^{-\nu z} = \hat{\tau}_{\text{react}} \quad (3.10)$$

führt. Mit

$$\mathcal{T} := \frac{\tau_{\text{R}}}{\tau_0} \quad (3.11)$$

¹Dies ist in Abbildung 3.1 veranschaulicht.

erhalten wir

$$\left| \frac{\hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s})}{1 + a \pi m \cos(\pi m \hat{s})} \mathcal{T} \right| = |\hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s})|^{-\nu z}. \quad (3.12)$$

Wir betrachten hier Schaltvorgänge mit geringer Amplitude, da ein zu großer Parameter a starke Oszillationen im Verlauf der Reaktionszeit und der inversen Übergangsrate zur Folge hat, was zu vielen Schnittpunkten führt (siehe hierzu Abbildung 3.2). Die sich daraus ergebende Gesamtanregungsenergie, als die Summe der Einzelanregungsenergien, kann als größer angenommen werden als die Einzelanregungsenergie eines Schnittpunktes, beim Schalten mit kleiner Amplitude.

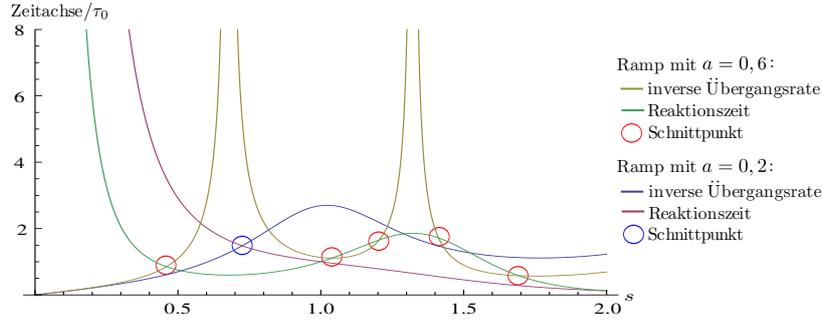


Abbildung 3.2: Darstellung der Reaktionszeit τ_{react} , der inversen Übergangsrate $\left| \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} \right|$ und der daraus resultierenden Schnittpunkte für zwei oszillierende Schaltvorgänge mit verschiedener Amplitude sowie $m = 1, \mathcal{T} = 1, \nu z = 3$. Größere Amplituden können dabei zu mehreren Schnittpunkten führen.

Leider finden wir hier kein Kriterium welches a erfüllen muss, um diese Mehrfachsnittpunkte zu verhindern. Dieses würde allerdings eine Bereicherung darstellen, wie wir in Abschnitt 3.6 sehen werden.

Eine Erhöhung des Oszillationsparameters m führt ebenfalls zu einer Verstärkung der Oszillationen von $\tau_{\text{react}}, \left| \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} \right|$. Eine Erhöhung von νz hat nur Einfluss auf die Reaktionszeit und macht diese für $\tau_{\text{react}} > 1$ größer sowie für $\tau_{\text{react}} < 1$ kleiner.

Um \hat{s} zu bestimmen, entwickeln s in (3.12) um

$$s_0 = \mathcal{T}^{-\frac{1}{1+\nu z}}, \quad (3.13)$$

die Lösung der Gleichung im linearen Fall (also $a = 0$). Mit $\hat{s} = s_0 + \Delta s$, der Taylorentwicklung² für

$$|a \pi m| \ll 1, \quad (3.14)$$

sowie den Additionstheoremen folgt

$$\begin{aligned} |s_0 + \Delta s + a \sin(\pi m(s_0 + \Delta s))| &= \mathcal{T}^{-\frac{1}{1+\nu z}} |1 + a \pi m \cos(\pi m(s_0 + \Delta s))|^{-\frac{1}{1+\nu z}} \\ s_0 + \Delta s + a (\sin(\pi m s_0) \cos(\pi m \Delta s) + \cos(\pi m s_0) \sin(\pi m \Delta s)) \\ - s_0 \left[1 + \frac{a \pi m}{1 + \nu z} (\cos(\pi m s_0) \cos(\pi m \Delta s) - \sin(\pi m s_0) \sin(\pi m \Delta s)) \right] &\approx 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

²Diese führt nach (2.37) und (2.36) zu $0 \leq r(s) \leq 1$, sodass wir den Betrag von $r(s)$ nicht weiter beachten müssen.

Unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta s^2)$ vereinfacht sich dies zu

$$\Delta s + \pi m \Delta s a \cos(\pi m s_0) + \pi m \Delta s s_0 \frac{a \pi m}{1 + \nu z} \sin(\pi m s_0) = s_0 \frac{a \pi m}{1 + \nu z} \cos(\pi m s_0) - a \sin(\pi m s_0),$$

und wir erhalten

$$\begin{aligned} \hat{s} = s_0 + \Delta s &= s_0 + \frac{a \left(\frac{\pi m s_0}{1 + \nu z} \cos(\pi m s_0) - \sin(\pi m s_0) \right)}{1 + a \pi m \left(\frac{\pi m s_0}{1 + \nu z} \sin(\pi m s_0) + \cos(\pi m s_0) \right)} \\ &= s_0 + \frac{a \left(\frac{\varphi}{1 + \nu z} \cos(\varphi) - \sin(\varphi) \right)}{1 + a \pi m \left(\frac{\varphi}{1 + \nu z} \sin(\varphi) + \cos(\varphi) \right)} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\approx s_0 + a \left(\frac{\varphi}{1 + \nu z} \cos(\varphi) - \sin(\varphi) \right) = s_0 + ab \quad (3.17)$$

mit

$$\varphi := \pi m s_0, \quad (3.18)$$

$$b := \frac{\varphi}{1 + \nu z} \cos(\varphi) - \sin(\varphi). \quad (3.19)$$

Wobei (3.17) gilt, da wir seit (3.15) nur noch Terme der Ordnung $\mathcal{O}(a \pi m)$ betrachten.

3.3 Bestimmung des letztmöglicher Auftaupunkts

Wir schätzen Reaktionszeit und inverse Übergangsrate unter Berücksichtigung von (3.14) und

$$s > |a| \quad (3.20)$$

nach oben und unten mit

$$\left| \frac{s + |a|}{1 - |a| \pi m} \mathcal{T} \right| \geq \left| \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} \right| \geq \left| \frac{s - |a|}{1 + |a| \pi m} \mathcal{T} \right| \quad (3.21)$$

$$|s - |a||^{-\nu z} \geq \tau_{\text{react}} \geq |s + |a||^{-\nu z} \quad (3.22)$$

ab.

Dies sind die gestrichelten Linien in den " $\left| \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} \right|, \tau_{\text{react}}$ vs s "-Graphen ab Abbildung 3.3. Wo sich die untere Grenze der inversen Übergangsrate mit der oberen Grenze der Reaktionszeit schneidet (siehe Abbildung 3.3), ist der letzte mögliche Auftaupunkt \hat{s}_{max} , der sich aus

$$\left| \frac{s - |a|}{1 + |a| \pi m} \mathcal{T} \right| \stackrel{!}{=} |s - |a||^{-\nu z} \quad (3.23)$$

$$\Rightarrow \hat{s}_{\text{max}} = |a| + \left| \frac{1 + |a| \pi m}{\mathcal{T}} \right|^{\frac{1}{1 + \nu z}} = |a| + s_0 |1 + |a| \pi m|^{\frac{1}{1 + \nu z}} \quad (3.24)$$

ergibt. Mit diesem Ausdruck lässt sich ein Algorithmus für die Suche nach $\hat{\epsilon}$ effektiver gestalten. Wir werden darauf in Kapitel 3.6 zurückkommen.

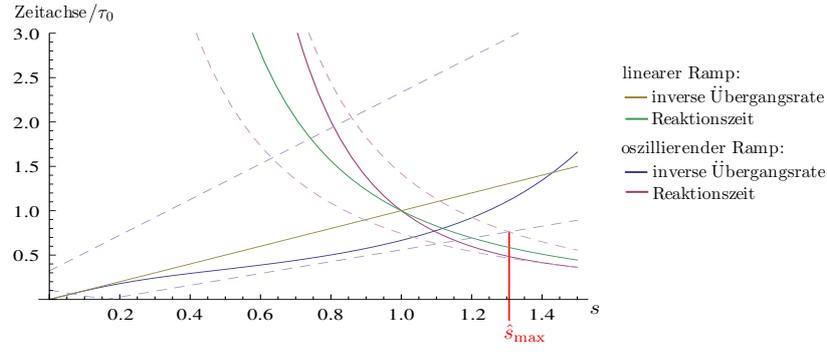


Abbildung 3.3: Letzter möglicher Schnittpunkt durch Abschätzen der Reaktionszeit τ_{react} und der inversen Übergangsrate $|\frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}}|$ nach oben und unten (gestrichelte Graphen) unter $a = -0,16, m = 1, \mathcal{T} = 1, \nu z = 2$.

3.4 Näherung der optimale Amplitude a

Die Anregungsenergie ist nach

$$\Delta E^{\frac{1}{\nu z}} \propto \hat{\epsilon} := \epsilon(\hat{s}) \propto \hat{r} := r(\hat{s}) = \hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s}) \quad (3.25)$$

direkt proportional zu einer Potenz von \hat{r} und damit nach (3.8) indirekt proportional zur Reaktionszeit. Hieraus können wir folgern, dass die Anregungsenergie umso niedriger sein wird, je höher der Schnittpunkt von inverser Übergangsrate und Reaktionszeit auf der Zeitachse liegt. Um die Anregungsenergie auf ein Minimum zu senken, reicht es, \hat{r} zu minimieren. Wir stellen (3.12) unter Verwendung von (3.14) nach

$$\hat{r} = s_0 |1 + a\pi m \cos(\pi m \hat{s})|^{\frac{1}{1+\nu z}} \quad (3.26)$$

um. Da die Funktion $|x|^{\frac{1}{1+\nu z}}$ streng monoton steigend in x für $x > 0$ ist, suchen wir das Minimum von $1 + a\pi m \cos(\pi m \hat{s})$. Unter der linearen Näherung (3.17) von \hat{s} , (3.14),

$$|\pi m a b| \ll 1, \quad (3.27)$$

und den Additionstheoremen erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{d \frac{dr(s)}{ds} / \mathcal{T}}{da} &\approx \frac{d}{da} [1 + a\pi m \cos(\pi m(s_0 + ab))] \\ &= \pi m \cos(\pi m(s_0 + ab)) + a\pi m (-\sin(\pi m(s_0 + ab))) \pi m b \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow a &= \frac{1}{\pi m b \tan(\pi m(s_0 + ab))} = \frac{1}{\pi m b} \frac{1 - \tan(\pi m s_0) \tan(\pi m a b)}{\tan(\pi m s_0) + \tan(\pi m a b)} \\ &\approx \frac{1}{\pi m b} \frac{1 - \tan(\varphi) \pi m a b}{\tan(\varphi) + \pi m a b}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Auflösen nach a liefert eine quadratische Gleichung mit der Lösung

$$a_{\pm} = -\frac{\tan(\varphi)}{\pi m b} \pm \frac{\sqrt{\tan^2(\varphi) + 1}}{\pi m b}. \quad (3.29)$$

Da $\sqrt{\tan^2(\varphi) + 1} \geq \tan(\varphi)$ folgt $a_+ \geq 0$ und $a_- \leq 0$. Welches der beiden a uns zu einem möglichst kleinen \hat{r} führt, ergibt sich aus der Steigung nach (3.28) bei $a = 0$,

$$\left. \frac{d \frac{dr(s)}{ds} / \mathcal{T}}{da} \right|_{a=0} = \pi m \cos(\varphi). \quad (3.30)$$

Ist diese positiv, sollten wir das negative a wählen und umgekehrt. Dies führt uns zu

$$a_{\text{opt}} = -\frac{\tan(\varphi)}{\pi mb} - \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \frac{\sqrt{\tan^2(\varphi) + 1}}{\pi mb}. \quad (3.31)$$

3.5 Abschätzung des optimalen Parameters φ

Wir wollen nun ein Minimum für die Anregungsenergie nach (3.7) bestimmen. Hierzu nähern wir $\hat{r}(a)$ als Parabel und maximieren

$$\hat{\Delta}\epsilon := \hat{\epsilon}_{\text{lin}} - \hat{\epsilon}_{\text{osz}} \propto \Delta\hat{r} := \hat{r}_{\text{lin}} - \hat{r}_{\text{osz}} = \hat{r} \Big|_{a=0} - \hat{r} \Big|_{a=a_{\text{opt}}}. \quad (3.32)$$

Parabelnäherung

Um das Minimum von $\hat{r}(a)$ zu finden betrachten wir eine Parabel der Form

$$p(x) = c(x - x_0)^2 + t.$$

Diese hat die Steigung

$$\frac{dp(x)}{dx} = 2c(x - x_0)$$

und an der Stelle x den Höhenunterschied zum Minimum

$$\Delta p(x) = p(x) - p(x_0) = c(x - x_0)^2 = \frac{1}{2}(x - x_0) \frac{dp(x)}{dx}.$$

Der Höhenunterschied $\Delta p(x)$ entspricht also $\frac{1}{2} \times$ Abstand zum Minimum \times Steigung am Punkt x .

Übertragen auf $\hat{r}(a)$ liegt das Minimum bei $a = a_{\text{opt}} \hat{=} x_0$ und es soll der Höhenunterschied an der Stelle $a = 0 \hat{=} x$ bestimmt werden, woraus

$$\Delta\hat{r} = -\frac{1}{2} a_{\text{opt}} \frac{d\hat{r}}{da} \Big|_{a=0} \quad (3.33)$$

folgt.

Lineare Näherung von \hat{r}

Um $\frac{d\hat{r}}{da} \Big|_{a=0}$ aus (3.33) zu bestimmen, entwickeln wir \hat{r} mit (3.17) und den Additionstheoremen als

$$\begin{aligned} \hat{r} &= \hat{s} + a \sin(\pi m \hat{s}) \approx s_0 + ab + a \sin(\varphi + \pi mab) \\ &= s_0 + ab + a [\sin(\varphi) \cos(\pi mab) + \cos(\varphi) \sin(\pi mab)] \\ &= s_0 + a \left[\frac{\varphi}{1 + \nu z} \cos(\varphi) \right] + \mathcal{O}(a^2). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Damit ist

$$\left. \frac{d\hat{r}}{da} \right|_{a=0} \approx \frac{\varphi}{1+\nu z} \cos(\varphi). \quad (3.35)$$

Energieersparnis

Für die relative Energieersparnis können wir nun nach (3.33)

$$\Delta\hat{\epsilon}_{\text{rel}} := \frac{\Delta\hat{\epsilon}}{\hat{\epsilon}_{\text{lin}}} = \frac{\hat{r}_{\text{lin}} - \hat{r}_{\text{osz}}}{\hat{r}_{\text{lin}}} = -\frac{1}{2}a_{\text{opt}} \left. \frac{d\hat{r}}{da} \right|_{a=0} \frac{1}{\hat{r}_{\text{lin}}} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} &\approx -\frac{1}{2} \frac{\varphi \cos(\varphi) - \tan(\varphi) - \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2 \varphi + 1}}{1 + \nu z} \frac{1}{\pi m \left(\frac{\varphi \cos(\varphi)}{1 + \nu z} - \sin(\varphi) \right)} \frac{1}{s_0} \\ &= \frac{\tan(\varphi) + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2(\varphi) + 1}}{2(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))} \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$= \frac{1 + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{1 + \frac{1}{\tan^2(\varphi)}}}{2 \left(\frac{\varphi}{\tan(\varphi)} - 1 - \nu z \right)} \quad (3.38)$$

erhalten. Um das Maximum der relativen Energieersparnis zu finden, leiten wir diesen Ausdruck nach φ ab und sehen, dass

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta\hat{\epsilon}_{\text{rel}}}{d\varphi} &\approx \frac{d}{d\varphi} \frac{\tan(\varphi) + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2(\varphi) + 1}}{2(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))} \\ &= 2(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi)) \\ &\quad \times \frac{\left(1 + \tan^2(\varphi) + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \frac{1}{2} (\tan^2(\varphi) + 1)^{-\frac{1}{2}} 2 \tan(\varphi) (1 + \tan^2(\varphi)) \right)}{4(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))^2} \\ &\quad - \frac{\left(\tan(\varphi) + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2(\varphi) + 1} \right) 2(1 - (1 + \nu z)(1 + \tan^2(\varphi)))}{4(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))^2} \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\left(b \frac{1 + \nu z}{\cos(\varphi)} \right) \left(\sqrt{1 + 2 \tan^2(\varphi) + \tan^4(\varphi)} + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2(\varphi) + \tan^4(\varphi)} \right)}{2(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))^2} \\ &\quad + \frac{- \left(\tan(\varphi) + \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \sqrt{\tan^2(\varphi) + 1} \right) (1 - (1 + \nu z)(1 + \tan^2(\varphi)))}{2(\varphi - (1 + \nu z) \tan(\varphi))^2} \end{aligned} \quad (3.40)$$

das Vorzeichen

$$\text{sgn} \left(\frac{d\Delta\hat{\epsilon}_{\text{rel}}}{d\varphi} \right) \approx \text{sgn} \left(\frac{\text{sgn} \left(\frac{b}{\cos(\varphi)} \right) (\dots \geq 0) - \text{sgn}(b \cos(\varphi)) (\dots \leq 0)}{(\dots)^2} \right) = \text{sgn}(b \cos(\varphi)) \quad (3.41)$$

hat.

Bevor wir diesen Ausdruck genauer diskutieren, soll hier darauf hingewiesen werden, dass dieser aufgrund der Parabelnäherung nur so lange Gültigkeit behält, wie $a_{\text{opt}} \ll \frac{1}{\pi m}$ (nach (3.14))

gilt. Dies ist nach (3.31) insbesondere bei $b \approx 0$ nicht mehr der Fall. In diesem Bereich müssen wir $\Delta\hat{\epsilon}_{\text{rel}}$ anderweitig untersuchen, gehen aber davon aus, dass die relative Energieersparnis ein Extremum besitzt, da deren Steigung wegen eines Vorzeichenwechsels von b (dazu später) und (3.41) links und rechts davon unterschiedliche Vorzeichen besitzt. Der Einfachheit halber nehmen wir weiter an, dass das Extremum dann genau bei $b = 0$ liegt, was praktisch nur näherungsweise erfüllt sein wird.

Um daraus φ zu bestimmen, setzen wir also

$$\begin{aligned} b &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\varphi \cos(\varphi)}{1 + \nu z} &= \sin(\varphi). \end{aligned}$$

Da $\cos(\varphi)$ nur bei $(2z + 1)\frac{\pi}{2}$ mit $z \in \mathbb{N}$ gleich Null ist, b hier aber ungleich Null ist, dürfen wir durch $\cos(\varphi)$ teilen und erhalten

$$\tan(\varphi) = \frac{\varphi}{1 + \nu z}. \quad (3.42)$$

Hieraus geht hervor, dass b in jedem Quadranten maximal einmal gleich Null wird und einen Vorzeichenwechsel hat, da beide Seiten streng monoton steigen, wobei $\frac{d \tan(\varphi)}{d\varphi} = 1 + \tan^2(\varphi) \geq 1$ und $\frac{d \frac{\varphi}{1 + \nu z}}{d\varphi} = \frac{1}{1 + \nu z} \leq 1$. Da im zweiten und vierten Quadranten der Tangens von minus Unendlich bis Null geht, während φ größer gleich Null ist, hat (3.42) nur im ersten und dritten Quadranten eine Lösung (siehe hierzu Abbildung 3.4).

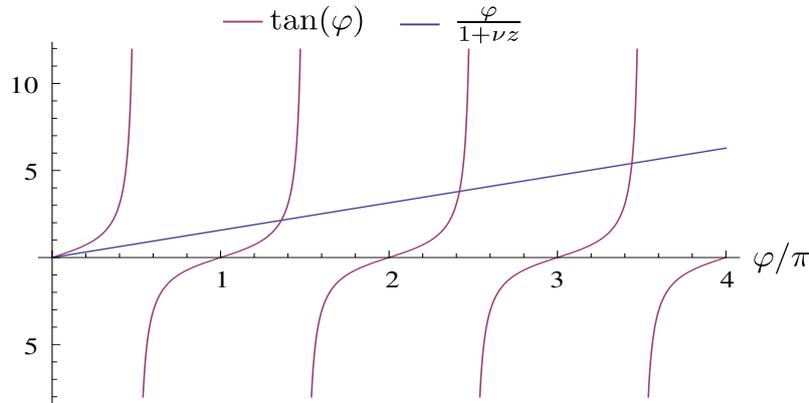


Abbildung 3.4: Linke und rechte Seite der Gleichung (3.42) mit $\nu z = 1$ zur Bestimmung der numerischen Lösung.

Die relative Anregungsenergie für den oszillierenden Fall und $b = 0$ erhalten wir mit

$$\begin{aligned} \sin^2(\varphi) &= 1 - \cos^2(\varphi) = \frac{1 + \tan^2(\varphi)}{1 + \tan^2(\varphi)} - \frac{1}{1 + \tan^2(\varphi)} = \frac{\tan^2(\varphi)}{1 + \tan^2(\varphi)} \\ \Leftrightarrow \operatorname{sgn}(\sin(\varphi)) \sin(\varphi) &= \frac{\operatorname{sgn}(\tan(\varphi)) \tan(\varphi)}{\sqrt{1 + \tan^2(\varphi)}} \\ \Leftrightarrow \sin(\varphi) &= \frac{\operatorname{sgn}(\cos(\varphi)) \tan(\varphi)}{\sqrt{1 + \tan^2(\varphi)}} \end{aligned} \quad (3.43)$$

über

$$\frac{\hat{\epsilon}_{\text{osz}}}{\hat{\epsilon}_{\text{lin}}}\Big|_{b=0} = \frac{\hat{r}_{\text{osz}}}{\hat{r}_{\text{lin}}}\Big|_{b=0} \quad (3.44)$$

$$\approx \frac{s_0 + a \sin(\pi m s_0)}{s_0} = \frac{s_0 + a \frac{\text{sgn}(\cos(\varphi)) \tan(\varphi)}{\sqrt{\tan^2(\varphi)+1}}}{s_0}$$

mit (3.42) $= 1 + \text{sgn}(\cos(\varphi)) \frac{a\pi m}{\sqrt{(1+\nu z)^2 + \varphi^2}}$, (3.45)

wodurch sich, mit $a = -\text{sgn}(\cos(\varphi)) |a|$ (nach (3.31)),

$$\Delta \hat{\epsilon}_{\text{rel}}\Big|_{b=0} \approx \frac{|a|\pi m}{\sqrt{(1+\nu z)^2 + \varphi^2}} \quad (3.46)$$

ergibt. Wir sehen, dass die relative Energieersparnis um so größer ist, desto kleiner φ ist.

Um nun den Verlauf von $\Delta \hat{\epsilon}_{\text{rel}}$ zu bestimmen führen eine Fallunterscheidung in den vier Quadranten durch. Hierbei sind besonders die Maxima von Interesse, da hier die Energieersparnis im Vergleich zum linearen Schalten am größten ist.

- $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$:

Hier gilt $\cos(\varphi) \geq 0$ sowie $b \leq 0$ (wegen ³). Hieraus folgt $\frac{d\Delta \hat{r}_{\text{rel}}}{d\varphi} \leq 0$. Das optimale φ ist hier also

$$\varphi_1 = 0, \quad (3.47)$$

für das gilt $b\Big|_{\varphi=0} = 0$. Die relative Anregungsenergie ergibt sich damit zu

$$\Delta \hat{r}_{\text{rel}}\Big|_{\varphi \approx 0} \approx \frac{|a|\pi m}{\sqrt{(1+\nu z)^2}}. \quad (3.48)$$

Da φ hier minimal ist, wird dies die beste erreichbare Energieersparnis für $b = 0$ sein. Allerdings ist ein $\varphi \approx 0$ nur mit sehr langen Schaltzeiten erreichbar welche im Experiment nicht immer möglich sind.

- $\varphi \in 2.$ Quadrant:

Es gilt $\cos(\varphi) \leq 0$, $\sin(\varphi) \geq 0$ sowie $b < 0$, woraus folgt $\frac{d\Delta \hat{r}_{\text{rel}}}{d\varphi} \geq 0$. Daraus erkennen wir, dass $\Delta \hat{\epsilon}_{\text{rel}}$ bei $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ein Minimum hat und bis zu $\varphi = \pi$ monoton steigt. Da zu Beginn des nächsten Quadranten $\Delta \hat{r}_{\text{rel}}$ weiterhin mit φ steigt, hat dieser Quadrant kein Maximum.

- $\varphi \in 3.$ Quadrant:

Hier ist $\cos(\varphi) \leq 0$ und $\sin(\varphi) \leq 0$. Zu beginn des Quadranten ist $b\Big|_{\varphi \approx \pi} \approx \frac{-\pi}{1+\nu z} \leq 0$, am Ende des Quadranten gilt allerdings $b\Big|_{\varphi \approx \frac{3}{2}\pi} \approx 1 \geq 0$. b hat also wie vorhergesagt einen Vorzeichenwechsel und $\Delta \hat{r}_{\text{rel}}$ steigt somit erst und fällt dann ab. Näherungsweise bei $b = 0$ befindet sich daher ein Maximum.

³ $b \leq 0 \Leftrightarrow \frac{\varphi \cos(\varphi)}{1+\nu z} \leq \sin(\varphi) \Leftrightarrow \frac{\varphi}{1+\nu z} \leq \varphi \leq \tan(\varphi)$ (Taylorentwicklung von $\tan(\varphi)$ um $\varphi \approx 0$, wobei $\varphi \leq \tan(\varphi)$ nur im 1. Quadranten uneingeschränkt gilt)

- $\varphi \in 4.$ Quadrant:
In diesem Quadranten ist $\cos(\varphi) \geq 0$, $\sin(\varphi) \leq 0$ und damit $b > 0$. $\Delta\hat{r}_{\text{rel}}$ ist damit auf dem ganzen Bereich steigend. Hieraus folgt, dass die relative Energieersparnis bei $\varphi = \frac{3\pi}{2}$ minimal ist. Dieser Quadrant hat kein Maximum, da $\Delta\hat{r}_{\text{rel}}$ zu Beginn des nächsten Quadranten weiter steigt.
- $\varphi \in 1.$ Quadrant $\wedge \varphi \geq 2\pi$:
Hier gilt $\cos(\varphi) \geq 0$ und $\sin(\varphi) \geq 0$. b hat hier einen Vorzeichenwechsel. Dieser Fall soll extra hinzugenommen werden, da $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ bezüglich seines Monotonieverhaltens zu Beginn des Quadranten eine Ausnahme darstellt. Da $\left. \frac{d\Delta\hat{r}_{\text{rel}}}{d\varphi} \right|_{\varphi \approx 2\pi} \geq 0$ ist, steigt die relative Energieersparnis bis b sein Vorzeichen wechselt und fällt dann wieder. Näherungsweise bei $b = 0$ haben wir daher ebenfalls ein Maximum.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass immer wenn (3.42) erfüllt ist, $\Delta\hat{r}_{\text{rel}}$ maximal wird. Dies ist in jedem ersten sowie im dritten Quadranten der Fall. Um möglichst energiearm anzuregen, sollte man nach (3.46) darauf achten, dass φ möglichst klein ist. Für den Fall, dass eine obere Grenze der möglichen Schaltzeit vorliegt, was einer unteren Grenze für φ entspricht, ist die beste Option das nächstgrößere φ zu wählen, welches (3.42) erfüllt. Die Einstellungen $\varphi = (2z + 1)\frac{\pi}{2}$ mit $z \in \mathbb{N}$ sollte man meiden, da hier keine Energieersparnis erzielt werden kann (die optimale Amplitude (3.31) wird für diesen Fall Null).

Die Einschränkung, dass m eine ganze Zahl sein muss, wurde nur gebraucht, um die Randbedingungen $r(0) = 0, r(1) = 1$ sicherzustellen. Eine Verallgemeinerung des untersuchten Einschaltvorgangs (analog zu Abschnitt 2.2) könnte eine Möglichkeit schaffen, mit $m \approx 0$ kleinere φ zu erzeugen und somit Verringerungen in der Anregungsenergie zu erzielen.

3.6 Auswertung der Ergebnisse

Das Verhältnis zwischen Anregungsenergie beim oszillierenden und beim linearen Schalten $\frac{\hat{\epsilon}_{\text{osz}}}{\hat{\epsilon}_{\text{lin}}}$ ist in Abbildung (3.5) zu sehen. Hier wurden die Parameter $\nu = z = 1$ gewählt, da diese den Quantenphasenübergang im eindimensionalen Quanten-Ising-Modell (mit periodischen Randbedingungen und Anzahl der Spins $\rightarrow \infty$) beschreiben [1]. Die schwarzen gestrichelten Linien kennzeichnen die numerischen Lösungen von φ für Gleichung (3.42). Die blaue Kurve ist die numerisch optimierte minimale Anregungsenergie. Hierzu wird für jedes φ die Amplitude innerhalb der Beschränkungen (3.14) und (3.27) (das \ll wird durch den Faktor $\frac{1}{2}$ ersetzt) hundertmal äquidistant erhöht, der maximale Schnittpunkt von Reaktionszeit und inverser Übergangsrate für jede Amplitude berechnet und die daraus resultierende Anregungsenergie ermittelt. Die minimale Anregungsenergie für die unterschiedlichen Amplituden zum jeweiligen φ wird dann geplottet. Diese Darstellung schließt nicht aus, dass sich Reaktionszeit und inverse Übergangsrate mehrfach schneiden. Dies würde einfach übersehen werden.

Die violette Kurve beruht auf der hergeleiteten analytischen Näherung und beschreibt die relative Anregungsenergie beim oszillierenden Schalten mit $a = a_{\text{ana}}$ in Abhängigkeit von φ . Die optimale Amplitude wird hierbei als

$$a_{\text{ana}} = -\text{sgn}(\cos(\varphi)) \times \min \left\{ |a_{\text{opt}}|(\text{nach (3.31)}), \frac{1}{2\pi m}(\text{nach (3.14)}), \frac{1}{2\pi m|b|}(\text{nach (3.27)}) \right\}, \quad (3.49)$$

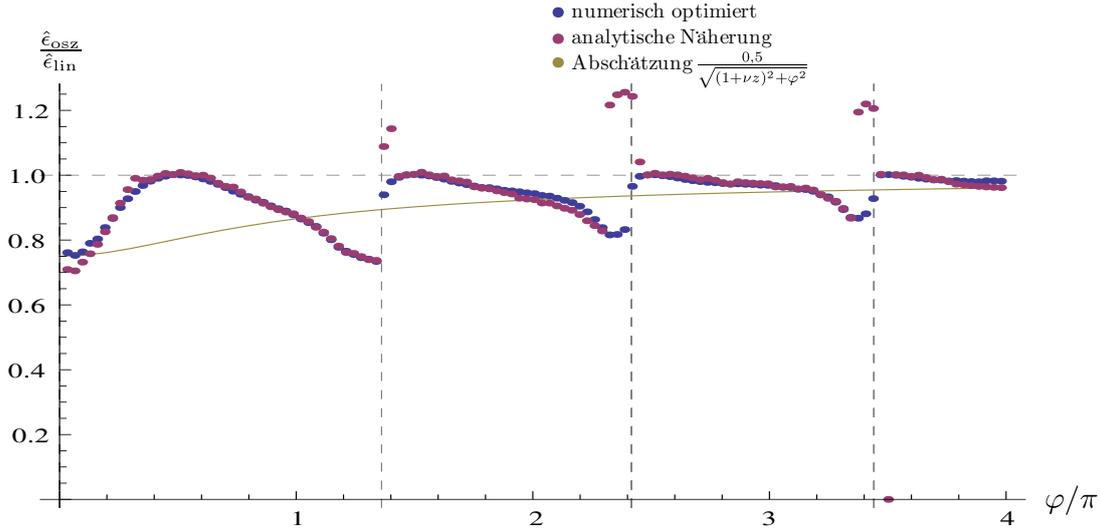


Abbildung 3.5: $\frac{\hat{\epsilon}_{osz}}{\hat{\epsilon}_{lin}}(\varphi)$ für $m = 1, \nu z = 1$: Vergleich unserer analytischen Näherung mit den numerisch optimierten Werten sowie Abschätzung (3.46). Die gestrichelten Werte von φ kennzeichnen die Lösungen der transzendenten Gleichung (3.42).

gewählt, wobei auch hier \ll durch den Faktor $\frac{1}{2}$ ersetzt wurde.

Der Schnittpunkt zwischen inverser Übergangsrate und Reaktionszeit ist in beiden Wertereihen bestimmt, indem s bei angefangen $1,01\hat{s}_{\max}$ nach (3.24) in hundert äquidistanten Schritten auf gerundet $0,01\hat{s}_{\max}$ reduziert wird. Sobald die Differenz zwischen inverser Übergangsrate und Reaktionszeit beim aktuellen s ihr Vorzeichen wechselt, wird das letzte s , ohne Vorzeichenwechsel, als \hat{s} angenommen.

Wir sehen deutlich die Minima (also die Maxima der Energieersparnis) in der Nähe (aber stets bei etwas kleineren φ) der Lösungen der transzendenten Gleichung (3.42) liegen. Unsere Abschätzung nach (3.46) erweist sich als weitgehend nutzlos, da diese $\frac{\hat{\epsilon}_{osz}}{\hat{\epsilon}_{lin}}$ an den Stellen mit $b = 0$ zwar gut wiedergibt, aber keine Aussage über die Position der Minima und deren Ausprägung geben kann. Dies liegt an unserer Annahme, dass $\Delta\hat{r}_{\text{rel}}$ genau bei $b = 0$ maximal wird, obwohl das Maximum lediglich in der Nähe davon liegen muss. Die steigende maximale Energieersparnis an den Lösungen von (3.46) mit kleiner werdendem φ lässt sich aber bestätigen.

Weiter ist anzumerken, dass es experimentell sinnvoll ist, etwas kleinere φ zu wählen, als uns (3.46) liefert, da rechts die Anregungsenergie sehr stark steigt während sie hingegen links nur schwach steigt. Man ist damit also resistenter gegen Abweichungen in der Kalibrierung der Gerätschaften.

Bei den Ausreißern in der analytischen Kurve mit $\frac{\hat{\epsilon}_{osz}}{\hat{\epsilon}_{lin}} > 1$ ist die Amplitude betragsmäßig so groß (an all diesen Stellen ist $a = \pm\frac{0,5}{\pi m}$ betragsmäßig maximal), dass sich Reaktionszeit und inverse Übergangsrate mehrfach schneiden, wie Abbildung 3.6 verdeutlicht. Leider existiert kein Kriterium für a , welches Mehrfachschnittpunkte verhindert. An den blauen Punkten sehen wir aber, dass mit einer etwas kleineren Amplitude ein mehrfaches Schneiden verhindert und eine Energieersparnis im Vergleich zum linearen Schalten zu erzielen werden kann. Dass die blauen Werte teils knapp über den violetten Werten liegen, erscheint widersprüchlich, da die

blauen Werte, wie bereits erwähnt, das Minimum der Anregungsenergie über alle möglichen Amplituden darstellen, liegt aber an der endlichen Abtastbreite

$$\Delta a = \frac{1}{100} \min \left\{ \frac{1}{2\pi m}, \frac{1}{2\pi m|b|} \right\} \leq 1.592 \times 10^{-3} \text{ für } m \geq 1 \quad (3.50)$$

mit der die Amplitude Stück für Stück erhöht wird.

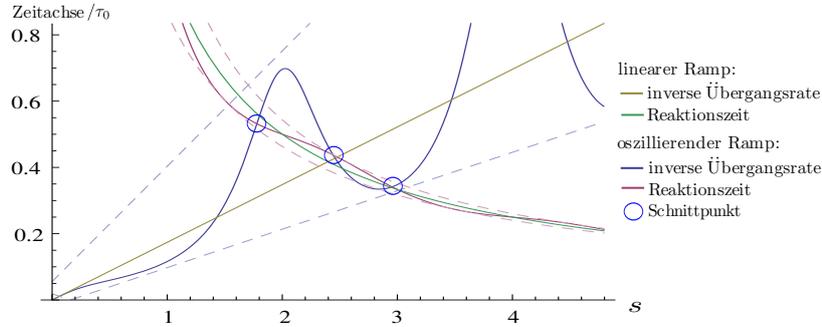


Abbildung 3.6: Illustration des mehrfachen Schneiden von Reaktionszeit und inverser Übergangsrate mit $m = 1$, $a = \frac{1}{2\pi}$, $\nu z = 1$, $\varphi = 2,4\pi$ um das Auftreten der Ausreißer aus Abbildung 3.5 zu verdeutlichen.

Die Anregungsenergie lässt sich beim oszillatorischen Schalten im Vergleich zum linearen Schalten durch einen quantenkritischen Punkt stark verringern, da diese nach (3.7) proportional zu einer Potenz von $\frac{\hat{\epsilon}_{\text{osz}}}{\hat{\epsilon}_{\text{lin}}}$ ist. Das detaillierte Verhalten der den Quantenphasenübergang beschreibenden Größen ist in Abbildung 3.7 zu sehen. Weiter ist der oszillierende Einschaltvorgang überall linearisierbar und damit resistent gegenüber einem Verfehlen des quantenkritischen Punktes, was nach [1] ein Problem des nichtlinearisierbaren Schalten ist. Da allerdings nicht genau feststeht, wie groß wir a maximal wählen dürfen, um ein mehrfaches Einfrieren und Auftauen des Systems zu vermeiden, und wir weiter nicht wissen, ob unsere Untersuchungen in der Näherung des KZM konkreten Modellen (wie dem Isingmodell) standhalten, bieten sich weitere Ermittlungen zu diesem vielversprechenden Thema an.

Legende:

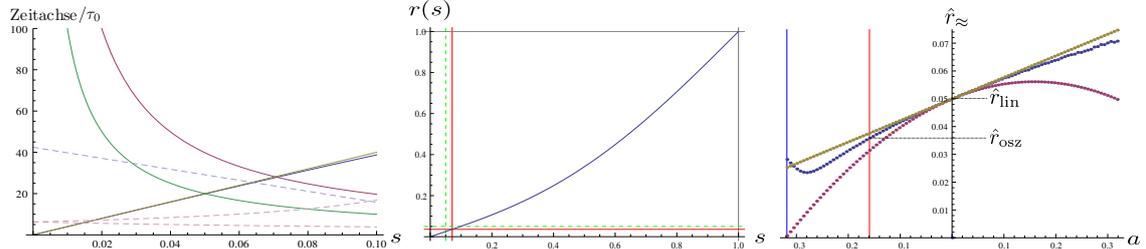
- linearer Ramp:
 — inverse Übergangsrate
 — Reaktionszeit
- oszillierender Ramp:
 — inverse Übergangsrate
 — Reaktionszeit

Verlassen des eingefrorenen Zustands bei $(\hat{s}, \hat{r}(s))$
 grün gestrichelt: linearer Ramp
 rot: oszillierender Ramp

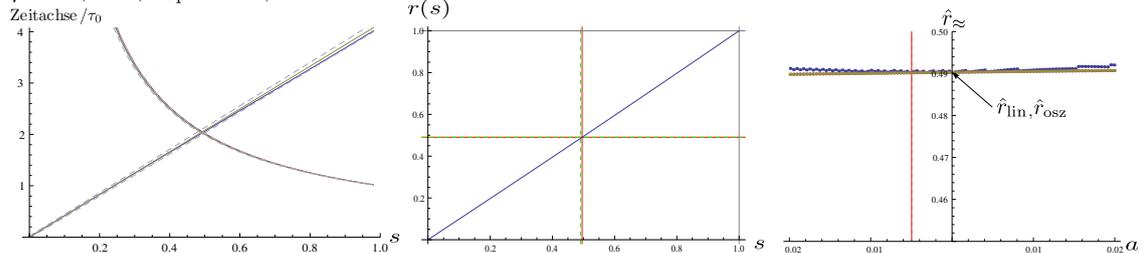
- $\hat{r}_{\approx} =$
 — numerisch genau: $\hat{r} = r(\hat{s})$
 — analytische Näherung: $r(s_0 + ab)$
 — lineare Taylorentwicklung: $s_0 + a \frac{\varphi}{1+\nu z} \cos(\varphi)$

- Senkrechte Grenzlinien:
 | blau:
 $\text{sgn}(\cos(\varphi)) \mathcal{MN} \left\{ \frac{1}{\pi m}, \frac{1}{\pi m |b|} \right\}$
 | schwarz gestrichelt: a_{\pm}
 | rot: a_{opt}

$\varphi = 0,05\pi, a_{\text{opt}} = -0,159:$



$\varphi = 0,49\pi, a_{\text{opt}} = -0,005:$



$\varphi = 1,30\pi, a_{\text{opt}} = 0,159:$

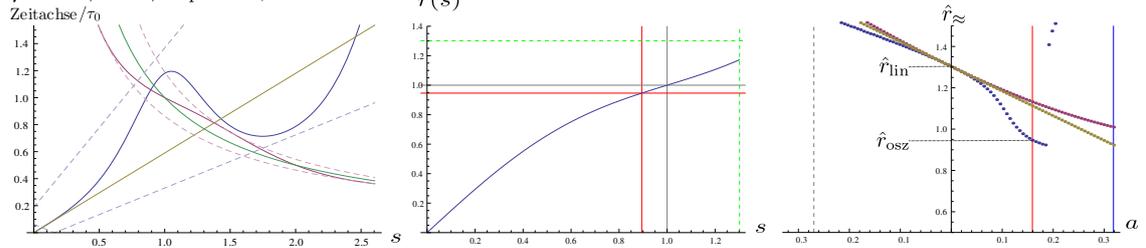


Abbildung 3.7: Überblick der Zeiten, des Schaltverlaufs sowie der optimalen Amplitude für verschiedene φ unter $\nu = z = 1, m = 1$. Die Grenzen der inversen Übergangsrate sowie der Reaktionszeit (blau, violette gestrichelt) im Fall $\varphi = 0,05\pi$ sind deshalb falsch, da hier im Widerspruch zu (3.20) $|a| > s$ ist.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Hinsichtlich des Problems des energiearmen Zuschaltens kleiner Störungen wurde gefunden, dass es sinnvoll ist Störungen, die innerhalb der Störungstheorie zweiter Ordnung beschreibbar sind, oszillierend zuzuschalten, wenn die Schaltzeit in der Größenordnung des inversen Hopping-Parameters liegt. Die Anregungsenergie wird hierbei umso niedriger, desto schärfer die Korrelationsfunktion des behandelten Systems gepeakt ist. Anschaulich lässt sich sagen, dass sich durch eine oszillatorische Änderung des Störparameters Anregungsübergänge im Bereich einer einstellbaren Energie gezielt meiden lassen. Je näher die durch die Störung erreichbaren Anregungszustände beieinander liegen, desto effektiver ist dieser Ansatz. Eine weitere Möglichkeit, die entstehende Anregungsenergie zu reduzieren, liegt in der Wahl einer möglichst großen Oszillationszahl bzw. Amplitude. Diese ist allerdings durch die experimentelle Umsetzbarkeit eingeschränkt.

Es wurde eine unvorhergesehene geringe Anregungsenergie außerhalb des Gültigkeitsbereichs unserer Näherungen gefunden. Eine Herleitung der Position und des Wertes dieses anregungsenergetischen Minimums würde den oszillierten Einschaltvorgang bezüglich einer Amplitudenbeschränkung weiter optimieren. Weiter haben wir zur Bestätigung unserer Ergebnisse nur eine der Literatur nachgeahmte Korrelationsfunktion verwendet. Mit der Simulation eines oszillatorischen Schaltvorgangs mit der exakten Korrelationsfunktion des Hubbardmodells (in unendlich vielen Dimensionen und ohne Wechselwirkung zwischen den Elektronen) könnte die Effektivität dieses Optimierungsansatzes überprüft werden. Zusätzlich wäre die Untersuchung der Effektivität des oszillatorischen Schaltens, welche stark abhängig von der Korrelationsfunktion ist, bezüglich anderer Modelle der Festkörperphysik interessant.

In Bezug auf das energiearme Schalten durch einen quantenkritischen Punkt spielt nach unseren Befunden neben einer geeigneten Amplitudenwahl vor allem die Schaltdauer und die Oszillationszahl eine entscheidende Rolle. Wenn eine Funktion dieser beiden Größen einen ungünstigen Wert annimmt, lässt sich durch oszillierendes Schalten im Vergleich zum linearen keinerlei Verbesserung erzielen; für einen günstigen Wert der Funktion hingegen ist in Abhängigkeit des Systems eine sehr deutliche Energieersparnis erreichbar. Diese Abhängigkeit spiegelt sich in den Parametern ν und z wieder, welche Exponenten in der Beziehung zwischen relativem Abstand zum quantenkritischen Punkt und Korrelationslänge bzw. Reaktionszeit sind. Je größer deren Produkt νz ist, desto höher ist die mögliche Energieersparnis.

Da die gesamte Analyse des oszillatorischen Schaltvorgangs durch einen quantenkritischen Punkt auf der Näherung des Kibble-Zurek-Mechanismus beruht, bedarf dieses Ergebnis noch der Verifikation anhand eines konkreten Modells wie dem eindimensionalen Quanten-Ising-Modell (z.B. mit periodischen Randbedingungen und Anzahl der Spins $\rightarrow \infty$). Weiter wäre eine Herleitung des noch ausstehenden Kriteriums zum Sicherstellen des einfachen Schneidens von Reaktionszeit und inverser Übergangsrate in Hinblick auf eine effektive und unkomplizierte Umsetzbarkeit wünschenswert.

Literaturverzeichnis

- [1] J. DZIARMAGA, *Dynamics of a quantum phase transition and relaxation to a steady state*, Advances in Physics **59**, 1063 (2010).
- [2] M. ECKSTEIN UND M. KOLLAR, *Near-adiabatic parameter changes in correlated systems: influence of the ramp protocol on the excitation energy*, New Journal of Physics **12**, 055012 (2010).
- [3] N. EURICH, M. ECKSTEIN UND P. WERNER, *Optimal ramp shapes for the fermionic hubbard model in infinite dimensions*, arXiv, 1010.2853v1 (2010).
- [4] M. IMADA, A. FUJIMORI UND Y. TOKURA, *Metal-insulator transitions*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
- [5] T. W. B. KIBBLE, *Topology of cosmic domains and strings*, Journal of Physics A: Mathematical and General **9**, 1387 (1976).
- [6] M. LEWENSTEIN, A. SANPERA, V. AHUFINGER, B. DAMSKI, A. SEN UND U. SEN, *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*, Advances in Physics **56**, 243 (2007).
- [7] A. POLKOVNIKOV, K. SENGUPTA, A. SILVA UND M. VENGALATTORE, *Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*, arXiv, 1007.5331 (2010).
- [8] S. SACHDEV, *Universal relaxational dynamics near two-dimensional quantum critical points*, Phys. Rev. B **59**, 14054 (1999).
- [9] J. M. TRANQUADA, J. D. AXE, N. ICHIKAWA, A. R. MOODENBAUGH, Y. NAKAMURA UND S. UCHIDA, *Coexistence of, and competition between, superconductivity and charge-stripe order in $La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO_4$* , Phys. Rev. Lett. **78**, 338 (1997).
- [10] W. H. ZUREK, *Cosmological experiments in superfluid-helium*, Nature **317**, 505 (1985).