

Dynamik von Quanten-Vielteilchensystemen
Equilibration, Thermalisierung und Typikalität
in quanten-statistischer Mechanik

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Dr. rer. nat.
an der Fakultät für Physik
der Universität Bielefeld

vorgelegt von
Ben Niklas Balz

02.07.2018

1. Gutachter und Promotionsbetreuer: Prof. Dr. Peter Reimann
2. Gutachter: Prof. Dr. Jürgen Schnack

Gedruckt auf alterungsbeständigem Papier °° ISO 9706

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Benutzung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe. Wörtlich übernommene Sätze oder Satzteile sind als Zitat belegt, andere Anlehnungen hinsichtlich Aussage und Umfang unter Quellenangabe kenntlich gemacht. Weiterhin sichere ich zu, dass die Arbeit noch nicht im Rahmen eines anderen Prüfungsverfahrens eingereicht wurde.

Publikationen des Doktorats in der Dissertation:

Entscheidende Fortschritte für das Forschungsfeld wurden, wie üblich, bereits publiziert. Dementsprechend reproduzieren die zentralen Kapitel der Dissertation diese Veröffentlichungen.

1. Kapitel 2.1 und 2.2 reproduzieren im Wesentlichen die Publikation:
B. N. Balz and P. Reimann, *Equilibration of isolated many-body quantum systems with respect to general distinguishability measures*, Phys. Rev. E **93**, 062107 (2016)
2. Kapitel 3.2 reproduziert im Wesentlichen die Publikation:
B. N. Balz, P. Reimann, *Typical relaxation of isolated many-body systems which do not thermalize*, Phys. Rev. Lett. **118**, 190601 (2017)
3. Kapitel 4.1 reproduziert im Wesentlichen die (ausstehende) Publikation:
B. N. Balz, J. Richter, J. Gemmer, R. Steinigeweg, and P. Reimann, *Dynamical Typicality for initial states with a preset measurement statistics of several commuting observables*, book chapter in 'Thermodynamics in the quantum regime - Recent Progress and Outlook' Springer (2018)

Dadurch erhält die Dissertation einen kumulativen Charakter, auch wenn die Reproduktion der Veröffentlichungen um neue Erkenntnisse sowie didaktische Querverweise ergänzt wurde. Wie ebenfalls üblich sind diese Publikationen auch nicht allein das Werk des Doktoranden sondern entstanden in Zusammenarbeit mit seinem Betreuer. An der Kap. 4.1 zugrunde liegenden Veröffentlichung waren im Rahmen einer Forschungskoooperation auch weitere Autoren beteiligt. Der in Kap. 4.1 wiedergegebene, analytische Teil geht jedoch allein auf den Doktoranden und seinen Betreuer zurück. Die Anregung und ursprüngliche Formulierung der Forschungsfragen wurden dabei durch den Betreuer gegeben. Daraufhin hat der Doktorand diese eigenständig präzisiert sowie eine Lösung entwickelt. Diese wurde dann in Rücksprache mit dem Betreuer überarbeitet und von ihm für die Veröffentlichung feingeschliffen. Für Kap. 2.2 gilt diese Arbeitsteilung nur teilweise. Hier hat der Betreuer die abschließende Formulierung des Unterscheidbarkeitsmaßes nach physikalischer Anregung und mathematischer Vorarbeit durch den Doktoranden, welcher selbst wiederum durch Prof. M. Kastner aus Stellenbosch auf die Problematik hingewiesen wurde, entscheidend gestaltet.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 5 |
| 2 | Equilibration in QM-Vielteilchensystemen | 7 |
| 2.1 | Stand der Forschung: isolierte Systeme | 7 |
| 2.1.1 | Anhang 2.A | 11 |
| 2.2 | Erweiterung auf allgemeine Unterscheidbarkeitsmaße | 19 |
| 2.2.1 | Anhang 2.B | 26 |
| 2.2.2 | Anhang 2.C | 28 |
| 2.3 | Equilibration ohne Thermalisierung? | 33 |
| 2.3.1 | Eigenstate Thermalisation Hypothesis (ETH) | 34 |
| 2.3.2 | Integrabilität und Many-Body Localization (MBL) | 35 |
| 3 | Typische Equilibrationsdynamik | 37 |
| 3.1 | Rückblick: Typikalität in quanten-statistischer Physik | 37 |
| 3.2 | Analytische Vorhersage für typische Relaxation | 38 |
| 3.2.1 | Anhang 3.A | 44 |
| 3.3 | Der Fall eines stark besetzten Vielteilchen-Niveaus | 57 |
| 3.3.1 | Anhang 3.B | 58 |
| 4 | Dynamische Typikalität | 66 |
| 4.1 | Anfangszustände mit vorgegebener Messstatistik bezüglich kom- mutierender Observablen | 66 |
| 4.1.1 | Anhang 4.A | 74 |
| 5 | Rückblick und Ausblick | 80 |

„Eine Theorie ist eindrucksvoller, je größer die Einfachheit ihrer Prämissen ist, je verschiedenartigere Dinge sie verknüpft und je weiter ihr Anwendungsbereich ist. Deshalb der tiefe Eindruck, den die klassische Thermodynamik auf mich machte. Es ist die einzige physikalische Theorie allgemeinen Inhaltes, von der ich überzeugt bin, daß sie im Rahmen der Anwendbarkeit ihrer Grundbegriffe niemals umgestoßen wird (zur besonderen Beachtung der grundsätzlichen Skeptiker).“

Albert Einstein [1]

1 Einleitung

Wir teilen Einsteins Einschätzung zur Thermodynamik, respektieren gleichzeitig aber die subtile Kritik ihrer Skeptiker: Im Alltagsleben sind Phänomene wie Equilibration und Thermalisierung allgegenwärtig und sogar unter experimentell kontrollierten Bedingungen sind sie ausreichend dokumentiert sowie verifiziert (abgesehen von besonderen Ausnahmen, auf welche wir in Kapitel 2.3 Bezug nehmen werden). Beispielsweise vermischt sich unser Kaffee mit der Milch und passt sich der Raumtemperatur an. Für unsere Auffassung von zerrinnender Zeit ist die scheinbare Irreversibilität der statistischen Mechanik, welche den theoretischen Unterbau für die Thermodynamik bildet, essentiell. Im Gegensatz dazu stehen einige feinsinnige, aber fundamentale Fragestellungen, vor allem, wenn man die Ansicht teilt, dass die Thermodynamik ohne weitere Postulate aus der Quantenmechanik ableitbar sein sollte: Warum sind makroskopische Phänomene reproduzierbar, obwohl die atomaren sowie molekularen Konfigurationen in jedem Experiment weitgehend unbekannt und nicht reproduzierbar sind? Wie ist die, in Form von Equilibration und Thermalisierung beobachtete, Irreversibilität mit den zugrunde liegenden mikroskopischen Gesetzen der Physik vereinbar, welche wesentlich (abgesehen von kleinen Effekten der elektroschwachen Kraft) zeitumkehrinvariant sind?

Zusammenfassend geht es in dieser Arbeit darum, der Herleitung der statistischen Mechanik aus der Quantenmechanik ein kleines Stück näher zu kommen. Dies ist nicht nur für die Grundlagenforschung von Relevanz, sondern auch in technologischen Anwendungen von Bedeutung. Trotz der zuvor erwähnten, ungeklärten Fragestellungen ermöglicht die Thermodynamik beispielsweise den Bau von Kühlschränken sowie Verbrennungsmotoren. Bei zukünftigen Entwicklungen auf der Nano-Skala ist ihre Anwendbarkeit nicht mehr so eindeutig. Hier verspricht die Beschäftigung mit obigen Fragestellungen ganz konkrete, praktische Implikationen.

Bereits im Jahr 1870 zeigte Loschmidt die Schwierigkeit auf, makroskopisch beobachtete Irreversibilität mit den reversiblen, mikroskopischen Gesetzen der Physik zu vereinbaren [2]. Im Rahmen der klassischen Mechanik gehen die Versuche diese Fragestellung zu beantworten unter anderem auf Maxwell und Boltzmann zurück [3]. Hierbei spielte die Ergodenhypothese eine zentrale Rolle [4]. Obwohl Boltzmann schließlich ein qualitatives Verständnis entwickelte [5], wel-

ches im Wesentlichen unserer aktuellen Ansicht zu Equilibration aus Kap. 2.1 ähnelt, gelang es im Rahmen der klassischen Mechanik nie eine quantitative Lösung zu präsentieren.

Wir werden im Folgenden im Formalismus der Quantenmechanik arbeiten, da diese die fundamentalere Theorie darstellt. Schon kurz nach der mathematischen Formulierung der Quantenmechanik wurden obige, grundlegende Fragestellungen durch von Neumann innerhalb der neu entwickelten Theorie untersucht [6]. Dieser wegweisende Beitrag wurde lange Zeit zu Unrecht als irrelevant betrachtet, bis 2010 Goldstein und Koautoren sein Konzept wiederentdeckten und begannen selbst auf diesem aufzubauen [7, 8, 9]. Einen ähnlichen Ansatz werden auch wir in dieser Arbeit verfolgen.

Im Verlauf von Kapitel 2 wird unsere Auffassung von Equilibration und Thermalisierung sowie der feine Unterschied dazwischen präzisiert. Dann wird der Leser¹ auf den aktuellen Stand der Forschung zu Equilibration von isolierten Quanten-Vielteilchensystemen gebracht (Kap. 2.1). In 2.2 erweitern wir diese Erkenntnisse von Erwartungswerten auf allgemeine Unterscheidbarkeitsmaße. Dieses Kapitel ist angelehnt an die Publikation [10], welche in Teilen auf die Masterarbeit des Autors zurückgeht und zu Beginn der Promotion ausgearbeitet wurde. Kapitel 3 erläutert zunächst das Konzept der Typikalität sowie deren bisherige Verwendung in der quantenstatistischen Mechanik, bevor wir einen analytischen Ausdruck für die typische Relaxation von isolierten Quanten-Vielteilchensystemen herleiten. Dieses Resultat wurde ebenso bereits während des Doktorats des Autors publiziert [11]. Dynamische Typikalität, ein Konzept, welches auf Gemmer und Bartsch zurückgeht [12] und die Reproduzierbarkeit makroskopischer Phänomene verdeutlicht, ist Thema in Kapitel 4. Dort, nämlich in Unterabschnitt 4.1, werden wir das dritte zentrale Resultat [13] dieser Dissertation vorstellen. Hierbei handelt es sich um dynamische Typikalität für Anfangszustände mit vorgegebener Messstatistik bezüglich kommutierender Observablen.

Faszinierend an dem Thema dieser Arbeit ist, mit Verweis auf das Zitat Einsteins, die gleichzeitige Anschaulichkeit und fundamentale Bedeutung der Fragestellung. Obwohl sie mittlerweile über hundert Jahre ungelöst ist, sind die hier präsentierten Ansätze mit grundlegenden Kenntnissen der statistischen Mechanik sowie Quantenmechanik zugänglich.

¹Wir weisen ausdrücklich daraufhin, dass trotz der nicht geschlechtsneutralen Formulierung stets alle Geschlechter angesprochen sind.

2 Equilibration in QM-Vielteilchensystemen

Erreicht ein makroskopisches System, welches in einem Nichtgleichgewichtszustand präpariert wurde und ab dann isoliert von seiner Umgebung evolviert, einen stationären Zustand? Aufgrund von „quantum revivals“², Zeitumkehrinvarianz und weiteren augenscheinlichen Gründen (siehe Kap. 2.1) kann diese Relaxation zu einem Equilibriumszustand, zumindest genau genommen, nicht existieren. Auf der anderen Seite beobachten wir täglich Equilibrationsphänomene. In diesem Sinne wurde bereits eine approximative, aber praktikable Form der Equilibration bewiesen [14, 15, 16, 17, 18]: Unter realistischen Voraussetzungen verbleibt der Erwartungswert einer quantenmechanischen Observablen für den überwiegenden Anteil aller hinreichend späten Zeiten extrem nah an einem konstanten Wert. Mit anderen Worten, die Abweichungen des Erwartungswertes von einem stationären Langzeitlimit sind entweder so klein oder so selten, dass kein realistisches Experiment den Unterschied detektieren kann. Im Folgenden werden wir diesen Stand der Forschung detailliert darlegen und darauf aufbauend eine Erweiterung auf allgemeine Unterscheidbarkeitsmaße präsentieren.

2.1 Stand der Forschung: isolierte Systeme

Ein isoliertes System wird durch einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator

$$H = \sum_n E_n P_n \quad (2.1)$$

auf einem Hilbertraum \mathcal{H} beschrieben, wobei die P_n Projektoren auf die disjunkten Eigenräume von H mit verschiedenen Eigenwerten E_n bezeichnen. Der Index n läuft, abhängig von dem zu beschreibenden System, entweder von 1 bis unendlich oder bis zu einer endlichen Obergrenze. Da wir uns auf räumlich begrenzte Systeme beschränken, können wir kontinuierliche Spektren vernachlässigen. Aus zwei Gründen betrachten wir nur isolierte Systeme: Zum einen können wir alle für den betrachteten Zeitraum relevanten Freiheitsgrade als ein großes isoliertes System auffassen. Zum anderen lassen sich offene Systeme in der Quantenmechanik bisher nicht ohne Brechung der Zeitumkehrinvarianz behandeln. Diese liegt aber gerade im Zentrum unserer Frage nach Equilibration und soll nicht durch die heuristische Modellierung einer Umgebung im Mastergleichungsformalismus vorweg genommen werden. Strenggenommen ist bereits für isolierte Systeme wegen der elektroschwachen Wechselwirkung die Zeitumkehrinvarianz gebrochen. Aber es ist kein Mechanismus erkennbar, der die Wirkung der elektroschwachen Kraft so amplifizieren würde, dass sie für die Thermalisierung von Kaffee verantwortlich wäre [3].

Hauptsächlich haben wir isolierte, makroskopische Vielteilchensysteme mit

²Bekanntermaßen kehren abgeschlossene, räumlich begrenzte Systeme zu einem bestimmten, wenn auch möglicherweise späten, Zeitpunkt beliebig nahe zu ihrem Ausgangszustand zurück. Dies gilt klassisch sowie quantenmechanisch und wird als quantum revival oder Poincaré Wiederkehr bezeichnet.

ungefähr

$$f \approx 10^{23} \quad (2.2)$$

Freiheitsgraden im Sinn. Zusammengesetzte Systeme, bestehend aus einem Subsystem von eigentlichem Interesse sowie einer viel größeren Umgebung (sog. Bad), sind daher als Spezialfälle enthalten. Nichtsdestotrotz sind unsere Ausführungen unter anderem auch für Systeme mit wenigen Freiheitsgraden aber einem hochdimensionalen „aktiven Hilbertraum“³ von Interesse.

Wie üblich werden Systemzustände (rein oder gemischt) durch Dichtematrizen ρ und Observablen durch hermitesche Operatoren A beschrieben. Erwartungswerte sind bekanntermaßen durch $\langle A \rangle_\rho := \text{Sp} \{ \rho A \}$ gegeben und die Zeitentwicklung durch $\rho(t) := \mathcal{U}_t \rho(0) \mathcal{U}_t^\dagger$ mit dem Propagator $\mathcal{U}_t := \exp(-iHt)$ sowie $\hbar = 1$. Dies impliziert, unter Benutzung von (2.1), dass $\mathcal{U}_t := \sum_n P_n \exp(-iE_n t)$, und folglich, dass

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \sum_{m,n} A_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}, \quad (2.3)$$

$$A_{mn} := \text{Sp} \{ P_m \rho(0) P_n A \}. \quad (2.4)$$

Kein realistisches Experiment resultiert in Messergebnissen mit mehr als 20 relevanten Ziffern; was einer sehr großzügigen Abschätzung gleichkommt. Daher ist das Verhältnis von Messbereich Δ_A zu experimenteller Auflösung δA beschränkt

$$\frac{\Delta_A}{\delta A} \leq 10^{20}. \quad (2.5)$$

Mit anderen Worten betrachten wir wirklichkeitsgetreu nur „grob-gekörnte“ (coarse-grained) Observablen, für welche der Abstand zwischen größtem und kleinsten Eigenwert dem Messbereich $\Delta_A := a_{\max} - a_{\min}$ entspricht.

Mit Blick auf Gleichung (2.1) beschreibt die spezifische Observable $A = P_n$ die Besetzungswahrscheinlichkeit des (möglicherweise entarteten) Energieniveaus E_n mit dem Erwartungswert

$$p_n := \text{Sp} \{ \rho(t) P_n \}. \quad (2.6)$$

Da die Projektoren P_n mit dem Hamiltonian H kommutieren (siehe Gleichung (2.1)), sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Energieniveaus p_n zeitunabhängig, sprich Erhaltungsgrößen. Deshalb sind diese vollständig durch die Anfangsbedingungen und somit durch die Systempräparation bestimmt.

Für typische makroskopische Systeme mit $f \approx 10^{23}$ Freiheitsgraden liegen die Energieniveaus unvorstellbar dicht. Unter realistischen experimentellen Bedingungen ist es deswegen praktisch unvermeidbar, eine entsprechend große, exponentiell in f skalierende, Anzahl an Energieniveaus signifikant zu populieren. Dies rechtfertigt im Umkehrschluss unsere physikalische Annahme, dass

³Unter einem hochdimensionalen „aktiven Hilbertraum“ verstehen wir, analog zu Gleichungen (2.6) und (2.7), dass die Besetzungswahrscheinlichkeit p_n für alle bis auf ein Energieniveau gering ist. Abgesehen von trivialen Fällen impliziert dies, dass viele Niveaus durch den Systemzustand populiert („aktiv“) werden. Folglich wird durch den Systemzustand ein hochdimensionaler Hilbertraum aufgespannt.

jede einzelne Besetzungswahrscheinlichkeit p_n extrem klein ist (im Vergleich zu $\sum_n p_n = 1$) und typischerweise die Abschätzung $\max_n p_n = 10^{-\mathcal{O}(f)}$ erfüllt. Im Folgenden werden wir sogar zulassen, dass ein Energieniveau möglicherweise keine verschwindend geringe Besetzungswahrscheinlichkeit aufweist, beispielsweise im Falle eines makroskopisch populierte Grundzustands. Dementsprechend nehmen wir im weiteren

$$\max'_n p_n = 10^{-\mathcal{O}(f)} \quad (2.7)$$

an, wobei $\max'_n p_n$ die zweitgrößte Besetzungswahrscheinlichkeit kennzeichnet.

Die etablierte Formulierung der Equilibrations-Problematik fragt, wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel dargelegt, ob, in welchem Sinne und unter welchen Voraussetzungen der Erwartungswert $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ aus Gl. (2.3) einen konstanten Wert im Langzeitlimit annimmt. Wie bereits diskutiert kann $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ natürlich nicht im strengen Sinne gegen einen solchen Langzeitlimit konvergieren, abgesehen von trivialen Fällen mit $A_{mn} = 0$ für alle $m \neq n$.

Es bleibt die Erwartung, dass $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ zumindest approximativ einen stationären Wert für die meisten hinreichend späten Zeiten t erreicht. Der intuitive Kandidat für einen solchen asymptotischen Wert, falls ein solcher überhaupt angenommen wird, ist das Mittel von $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ über alle Zeiten $t \geq 0$. Weil alle Energien E_n verschieden sind, kann man umgehend aus Gleichung (2.3) schließen, dass dieser mutmaßliche stationäre Wert durch $\langle A \rangle_{\bar{\rho}} := \text{Sp} \{ \bar{\rho} A \}$ gegeben ist. Hierbei ist

$$\bar{\rho} := \sum_n P_n \rho(0) P_n \quad (2.8)$$

ein nicht negativer, hermitescher Operator mit $\text{Sp} \{ \bar{\rho} \} = 1$ und somit eine wohldefinierte Dichtematrix.

Ein Resultat von obiger Form wird in 2.1.1 hergeleitet, indem Techniken, welche in [16, 17, 18] ihren Ursprung haben, kombiniert und weiterentwickelt werden. Dort wird nämlich gezeigt, dass folgende Ungleichung für alle hinreichend späten Zeiten T gilt:

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt [\sigma(t)]^2 \leq 3 \text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} g \max'_n p_n, \quad (2.9)$$

$$\sigma(t) := \langle A \rangle_{\rho(t)} - \langle A \rangle_{\bar{\rho}}, \quad (2.10)$$

wobei g der maximalen Entartung der Energielücken entspricht,

$$g := \max_{m \neq n} |\{(k, l) : E_k - E_l = E_m - E_n\}|, \quad (2.11)$$

mit $|S|$ als Bezeichnung für die Anzahl der Elemente in der Menge S . Mit anderen Worten entspricht g der maximalen Anzahl an exakt übereinstimmenden Energieabständen unter allen möglichen Paaren unterschiedlicher Energieeigenwerte. In der Literatur wird oft anstatt (2.10) auch die sogenannte Spurdistanz (engl. trace distance) benutzt, welche $|\sigma(t)|$ bezüglich aller $A \in \mathcal{H}$ maximiert [15]. Weil das optimale A aber im Allgemeinen nicht physikalisch realisierbar ist, empfinden wir diese Annahme als stark einschränkend.

Mit Blick auf (2.7) und unter Vernachlässigung außerordentlich großer Entartung der Energielücken g ist das zeitliche Mittel auf der linken Seite von (2.9) verschwindend klein. Das impliziert wiederum, dass der Betrag der Differenz (2.10) ebenfalls für die meisten Zeiten $t \in [0, T]$ verschwindend gering sein muss. Um diese Argumentation quantitativ zu untermauern, definieren wir für alle $\epsilon > 0$ und $T > 0$ die Größe

$$T_\epsilon := |\{0 \leq t \leq T : |\sigma(t)| > \epsilon\}|, \quad (2.12)$$

wobei $|S|$ nun die Größe (Lebesgue-Maß) der Menge S bezeichnet. Dementsprechend ist T_ϵ das Maß für alle Zeiten $t \in [0, T]$, für welche $|\sigma(t)| > \epsilon$ gilt. Folglich gilt ebenfalls, dass $|\sigma(t)|^2 > \epsilon^2$ für eine Menge an Zeiten t vom Maß T_ϵ sowie dass $0 \leq |\sigma(t)|^2 \leq \epsilon^2$ für alle übrigen Zeiten $t \in [0, T]$. Daher ist das zeitliche Mittel auf der linken Seite von (2.9) durch $\epsilon^2 T_\epsilon / T$ von unten beschränkt. Somit folgt für jedes $\epsilon > 0$, dass

$$T_\epsilon / T \leq 3 \operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} g \max'_n p_n / \epsilon^2 \quad (2.13)$$

für alle hinreichend späten T .

Wenn man A durch $A + c \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$, mit c einer beliebigen reellen Zahl und $\mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ der Einheitsmatrix, ersetzt, bleibt die linke Seite von Gleichung (2.9) unverändert. Infolgedessen können wir auf der rechten Seite von (2.9) A durch $A + c \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ mit beliebigem c ersetzen. Jetzt wählen wir c so, dass $|a_\nu - c| \leq \Delta_A / 2$ für alle Eigenwerte a_ν von A . Damit folgt, dass $\operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} (A + c \mathbf{1}_{\mathcal{H}})^2 \} \leq (\Delta_A / 2)^2$ auf der rechten Seite von (2.9) und ebenso in (2.13), womit

$$\frac{T_\epsilon}{T} \leq \frac{3 \Delta_A^2 g \max'_n p_n}{4 \epsilon^2} \quad (2.14)$$

für alle hinreichend späten T .

Gleichung (2.14) repräsentiert zusammen mit (2.7), (2.11) sowie (2.12) die bisherige Antwort auf die oben formulierte Problematik der Equilibration: Die Menge aller Zeitpunkte T_ϵ , für welche der „wahre“ Erwartungswert $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ vom konstanten Wert $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$ um mehr als ein gegebenes $\epsilon > 0$ abweicht, ist für alle hinreichend späten T durch (2.14) beschränkt. Identifiziert man ϵ mit der experimentellen Auflösung δA und erkennt, dass die rechte Seite von (2.14) aufgrund von (2.7) verschwindend klein ist, folgt, dass $\langle A \rangle_{\rho(t)}$ für die überwiegende Mehrheit aller Zeiten $t \in [0, T]$ im Rahmen jeder experimentell erreichbaren Messgenauigkeit konstant ist. Insbesondere muss T so groß sein, dass die anfängliche Nichtgleichgewichtsdynamik in einem viel kürzeren Zeitintervall, im Vergleich zu $[0, T]$, abgeklungen ist.

Wir merken an, dass Hamiltonoperatoren mit entarteten Energielücken, grob gesagt, vom Maß null bezüglich aller möglichen Hamiltonians sind. Sie treten nur infolge von besonderen Gründen wie (perfekten) Symmetrien oder speziellen Parametern (fine tuning) auf. Typischerweise sind daher alle nicht trivialen Energielücken $E_m - E_n$ (sprich solche mit $m \neq n$) verschieden; was $g = 1$ in

(2.11) impliziert. Obige Resultate bleiben sogar für nicht generische Fälle mit $g > 1$ weiterhin gültig, solange g dabei im Vergleich zu $(\max'_n p_n)^{-1}$ hinreichend klein bleibt. Ebenso sind Hamiltonoperatoren mit entarteten Energieeigenwerten im Prinzip nicht generisch, aber nichtsdestotrotz in (2.1) zugelassen.

Zusammenfassend ist der wahre Erwartungswert, und damit der Zustand $\rho(t)$, für alle hinreichend späten Zeiten t experimentell ununterscheidbar von der zeitunabhängigen Approximation, mittels $\bar{\rho}$, und das unter sehr schwachen Einschränkungen bezüglich des Anfangszustands, der Observable und des Hamiltonians.

2.1.1 Anhang 2.A

Dieser Anhang erbringt die Herleitung der Gleichungen (2.9) und (2.10). Das heißt wir zeigen, dass für alle hinreichend späten T

$$\int_0^T \frac{dt}{T} [\sigma(t)]^2 \leq 3 \operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} g \max'_n p_n, \quad (2.15)$$

$$\sigma(t) := \operatorname{Sp} \{ \rho(t) A \} - \operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} A \}, \quad (2.16)$$

wobei g der maximalen Entartung der Energielücken aus (2.11) und $\max'_n p_n$ der zweitgrößten Besetzungswahrscheinlichkeit aller Energieniveaus entspricht (siehe (2.7) sowie darüber).

Vorarbeiten: Wir erinnern uns, dass die P_n in (2.1) Projektoren auf die Eigenräume des Hamiltonoperators H entsprechen. Hierbei läuft n von 1 bis unendlich oder bis zu einer endlichen oberen Grenze. Mit anderen Worten ist $n \in I$, wobei die Indexmenge I entweder \mathbb{N} gleicht oder von der Form $\{1, \dots, L\}$ mit einem endlichen $L \in \mathbb{N}$ sein muss. Diese Projektoren P_n genügen den üblichen Orthogonalitäts- sowie Vollständigkeitsrelationen

$$P_m P_n = \delta_{mn} P_n \quad (2.17)$$

für alle $m, n \in I$ und

$$\sum_{n \in I} P_n = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (2.18)$$

Als nächstes definieren wir

$$\rho_n := P_n \rho(0) P_n \quad (2.19)$$

und bezeichnen mit S_0 die Menge an Operatoren, welche alle P_n sowie ρ_n enthält. Alle diese Operatoren in S_0 sind hermitesch und kommutieren miteinander, sodass eine gemeinsame Eigenbasis für sie existiert. Folglich gibt es eine Orthonormalbasis $\{|\gamma\rangle\}_{\gamma=1}^d$, deren Dimension d endlich oder unendlich sein kann und deren Projektoren $P_\gamma := |\gamma\rangle\langle\gamma|$ mit allen Operatoren aus S_0 kommutieren. In direkter Konsequenz kommutieren auch die Projektoren

$$X := \sum_{\gamma=1}^D |\gamma\rangle\langle\gamma|, \quad (2.20)$$

$$Y := \mathbb{1}_{\mathcal{H}} - X = \sum_{\gamma=D+1}^d |\gamma\rangle \langle \gamma| \quad (2.21)$$

mit allen P_n und ρ_n . Beispielsweise gilt

$$XP_n = P_nX, \quad X\rho_n = \rho_nX \quad (2.22)$$

für alle n und ebenso für Y anstatt X . Mit der Definition

$$\tilde{A} := XAX \quad (2.23)$$

folgt unter Betrachtung von (2.22), dass

$$\tilde{P}_n := XP_nX = P_nX = XP_n. \quad (2.24)$$

Insbesondere, wenn man \tilde{A}_{mn} analog zu (2.4) definiert, lässt sich schnell verifizieren, dass

$$\tilde{A}_{mn} := \text{Sp} \left\{ P_m \rho(0) P_n \tilde{A} \right\} = \text{Sp} \left\{ \tilde{P}_m \rho(0) \tilde{P}_n A \right\}, \quad (2.25)$$

indem man (2.22), (2.23) und die Invarianz der Spur unter zyklischer Permutation ausnutzt.

Für jeden Basisvektor $|\gamma\rangle$ kann man aus (2.17) und (2.18) schließen, dass $P_n |\gamma\rangle$ für genau einen Index n dem Zustand $|\gamma\rangle$ entspricht (Eigenwert 1) und für alle übrigen Indizes den Nullvektor $|0\rangle$ ergibt (Eigenwert 0). Da D in (2.20) endlich ist, sind mindestens ein und höchstens D der \tilde{P}_n ungleich Null. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wählen wir die Indizes n und eine geeignete ganze Zahl $N \in \{1, \dots, D\}$ so, dass \tilde{P}_n ausschließlich für $n \in \{1, \dots, N\}$ nicht verschwindet. Zudem wählen wir die Indizes γ und n so, dass die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Energieniveaus aus (2.6) ihren maximalen Wert für $n = 1$ annehmen:

$$\max_n p_n = p_1. \quad (2.26)$$

Dementsprechend gilt für die zweitgrößte Besetzungswahrscheinlichkeit

$$\max'_n p_n = \max_{n \geq 2} p_n. \quad (2.27)$$

Folglich verschwindet \tilde{A}_{mn} in (2.25) sofern nicht $m \leq N$ und $n \leq N$. Mit (2.3) können wir dann folgern, dass

$$\left\langle \tilde{A} \right\rangle_{\rho(t)} = \sum_{m,n=1}^N \tilde{A}_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}. \quad (2.28)$$

Ebenso findet man mittels (2.8) sowie (2.23), dass

$$\text{Sp} \left\{ \tilde{\rho} \tilde{A} \right\} = \sum_{n=1}^N \tilde{A}_{nn}. \quad (2.29)$$

Zusammengenommen erhalten wir

$$\tilde{\sigma}(t) := \text{Sp} \left\{ \rho(t) \tilde{A} \right\} - \text{Sp} \left\{ \bar{\rho} \tilde{A} \right\} = \sum_{m \neq n}^N \tilde{A}_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}. \quad (2.30)$$

Da $\rho(0)$ ein hermitescher, nicht negativer Operator ist, existiert ein hermitescher, nicht negativer Operator, welchen wir mit $\rho^{1/2}$ bezeichnen und welcher der Relation $\rho^{1/2} \rho^{1/2} = \rho(0)$ genügt. Mittels der Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\left| \text{Sp} \{ B^\dagger C \} \right|^2 \leq \text{Sp} \{ B^\dagger B \} \text{Sp} \{ C^\dagger C \} \quad (2.31)$$

für das Skalarprodukt $\text{Sp} \{ B^\dagger C \}$ von beliebigen Operatoren B und C sowie unter Ausnutzung von $P_m = P_m^2$ [vgl. (2.17)] und der Invarianz der Spur unter zyklischer Permutation können wir aus (2.25) schließen, dass

$$\begin{aligned} \left| \tilde{A}_{mn} \right|^2 &= \left| \text{Sp} \left\{ \left(P_m \rho^{1/2} \right) \left(\rho^{1/2} P_n \tilde{A} P_m \right) \right\} \right|^2 \\ &\leq \text{Sp} \{ P_m \rho(0) P_m \} \text{Sp} \left\{ P_n \rho(0) P_n \tilde{A} P_m \tilde{A} \right\}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Den ersten Faktor im letzten Schritt identifizieren wir als die Besetzungswahrscheinlichkeit aus (2.6). In Kombination mit (2.19), (2.23) sowie (2.24) finden wir

$$\left| \tilde{A}_{mn} \right|^2 \leq p_m \text{Sp} \{ \rho_n X A X P_m X A X \} = p_m \text{Sp} \left\{ X \rho_n A \tilde{P}_m A \right\}. \quad (2.33)$$

Als nächstes beobachten wir, dass sowohl $A \tilde{P}_m A$ als auch ρ_n aus (2.19) hermitesche, nicht negative Operatoren sind und dass jeder Zustand $|\gamma\rangle$ ein Eigenvektor von ρ_n sowie X aus (2.20) ist. Wir werten die Spur in (2.33) nun in dieser Basis $\{ |\gamma\rangle \}_{\gamma=1}^d$ aus und erhalten

$$\left| \tilde{A}_{mn} \right|^2 \leq p_m \text{Sp} \left\{ \rho_n A \tilde{P}_m A \right\}. \quad (2.34)$$

Mittels $P_m^2 = P_m$ (vgl. (2.17)) sowie (2.24) folgern wir, dass $\tilde{P}_m = P_m X P_m$. Die zyklische Invarianz der Spur nutzend, können wir den letzten Faktor in (2.34) als $\text{Sp} \{ X B \}$ schreiben, wobei $B := P_m A \rho_n A P_m$. Da B ein hermitescher, nicht negativer Operator ist, gilt, dass $\text{Sp} \{ X B \} \leq \text{Sp} \{ B \} = \text{Sp} \{ \rho_n A P_m A \}$. Letztendlich bekommen wir

$$\left| \tilde{A}_{mn} \right|^2 \leq p_m \text{Sp} \{ \rho_n A P_m A \}. \quad (2.35)$$

Schritt 1: In diesem Abschnitt werden wir uns eng an die Argumentationskette aus [17] halten. Aus (2.20) und (2.21) resultiert für beliebige Dichtematrizen ρ sowie Observablen A , dass

$$\text{Sp} \{ \rho A \} = \text{Sp} \{ (X + Y) \rho (X + Y) A \} = R_1 + R_2 + R_3, \quad (2.36)$$

$$R_1 := \text{Sp} \{X\rho X A\}, \quad (2.37)$$

$$R_2 := \text{Sp} \{Y\rho(X+Y)A\} = \text{Sp} \{Y\rho A\}, \quad (2.38)$$

$$R_3 := \text{Sp} \{X\rho Y A\}. \quad (2.39)$$

Unter Benutzung der zyklischen Invarianz der Spur sowie von Definition (2.23) ergibt sich

$$R_1 = \text{Sp} \left\{ \rho \tilde{A} \right\}. \quad (2.40)$$

Durch Umformungsschritte, die denen der Ableitung von (2.32) gleichen, können wir (2.38) umschreiben zu

$$|R_2|^2 \leq \text{Sp} \{Y\rho Y\} \text{Sp} \{A\rho A\}. \quad (2.41)$$

Nun nutzen wir aus, dass für beliebige hermitesche, nicht negative Operatoren B und C

$$\text{Sp} \{BC\} \leq \|B\| \text{Sp} \{C\}, \quad (2.42)$$

wobei $\|B\|$ die Operatornorm, sprich den größten Eigenwert, kennzeichnet, um den letzten Term in (2.41) folgendermaßen abzuschätzen

$$\text{Sp} \{A\rho A\} = \text{Sp} \{\rho A^2\} \leq \|A^2\| \text{Sp} \{\rho\} = \|A\|^2 < \infty. \quad (2.43)$$

Unsere realistische Einschränkung auf Observablen A mit einem finiten Messbereich Δ_A rechtfertigt die letzte Ungleichung. Schließlich können wir aus (2.21) schlussfolgern, dass

$$\text{Sp} \{Y\rho Y\} = \text{Sp} \{Y\rho\} = \sum_{\gamma=D+1}^d \langle \gamma | \rho | \gamma \rangle, \quad (2.44)$$

und unter Verweis auf (2.41), dass

$$|R_2|^2 \leq \|A\|^2 \sum_{\gamma=D+1}^d \langle \gamma | \rho | \gamma \rangle. \quad (2.45)$$

Analog findet man für R_3 aus (2.39), dass

$$|R_3|^2 \leq \text{Sp} \{Y\rho Y\} \|A\|^2 \text{Sp} \{X\rho X\} \leq \|A\|^2 \sum_{\gamma=D+1}^d \langle \gamma | \rho | \gamma \rangle. \quad (2.46)$$

Setzen wir (2.40), (2.45) sowie (2.46) in (2.36) ein, erhalten wir

$$\left| \text{Sp} \{\rho A\} - \text{Sp} \left\{ \rho \tilde{A} \right\} \right| \leq 2 \|A\| \left(\sum_{\gamma=D+1}^d \langle \gamma | \rho | \gamma \rangle \right)^{1/2} \quad (2.47)$$

für beliebige Dichteoperatoren ρ .

Als nächstes fokussieren wir uns auf die zwei spezifischen Dichtematrizen $\rho(t)$ sowie $\bar{\rho}$ aus Kapitel 2.1. Mit der Definition

$$\delta(t) := \sigma(t) - \tilde{\sigma}(t) \quad (2.48)$$

folgt umgehend aus (2.16), (2.30), (2.47) sowie (2.48), dass

$$\begin{aligned} |\delta(t)| &= \left| \text{Sp} \{ \rho(t) A \} - \text{Sp} \{ \bar{\rho} A \} - \text{Sp} \{ \rho(t) \tilde{A} \} + \text{Sp} \{ \bar{\rho} \tilde{A} \} \right| \\ &\leq \left| \text{Sp} \{ \rho(t) A \} - \text{Sp} \{ \rho(t) \tilde{A} \} \right| + \left| \text{Sp} \{ \bar{\rho} A \} - \text{Sp} \{ \bar{\rho} \tilde{A} \} \right| \\ &\leq 4 \|A\| \left(\sum_{\gamma=D+1}^d \langle \gamma | \bar{\rho} | \gamma \rangle \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Im letzten Schritt haben wir davon Gebrauch gemacht, dass $\langle \gamma | \rho(t) | \gamma \rangle = \langle \gamma | \bar{\rho} | \gamma \rangle$ für alle t und γ .

Wir erinnern uns, dass $\|A\|$ endlich ist (vgl. (2.43)), und bemerken, dass $\sum_{\gamma=1}^D \langle \gamma | \bar{\rho} | \gamma \rangle$ monoton mit D wächst sowie durch $\text{Sp} \{ \bar{\rho} \}$ von oben beschränkt ist. Damit folgt aus (2.49), dass für jedes gegebene $\epsilon > 0$ ein endliches D existiert, so dass

$$\delta^2(t) \leq \epsilon \quad (2.50)$$

für alle t . Das ist das zentrale Resultat dieses Abschnitts.

Schritt 2: In diesem Abschnitt werden wir uns eng an die Herangehensweise aus [19, 20] halten, welche selbst einer Vereinfachung des vorangegangenen Ansatzes aus [16] entspricht.

Wir bezeichnen die Menge der Paare ungleicher Indizes als

$$\mathbb{G} := \{(m, n) : m, n \in \{1, \dots, N\}, m \neq n\} \quad (2.51)$$

und definieren für jedes $\alpha = (m, n) \in \mathbb{G}$

$$G_\alpha := E_m - E_n, \quad v_\alpha := \tilde{A}_{mn}. \quad (2.52)$$

Daraus und mit Verweis auf (2.30) ergibt sich

$$\tilde{\sigma}^2(t) = \left| \sum_{\alpha \in \mathbb{G}} v_\alpha \exp(-iG_\alpha t) \right|^2 = \sum_{\alpha, \beta \in \mathbb{G}} v_\alpha^* v_\beta \exp(i[G_\alpha - G_\beta]t) \quad (2.53)$$

und hiermit, dass

$$\tilde{\sigma}^2(t) = R(t) + S, \quad (2.54)$$

$$R(t) := \sum_{\substack{\alpha, \beta \in \mathbb{G} \\ G_\alpha \neq G_\beta}} v_\alpha^* v_\beta \exp(i[G_\alpha - G_\beta]t), \quad (2.55)$$

$$S := \sum_{\substack{\alpha, \beta \in \mathbb{G} \\ G_\alpha = G_\beta}} v_\alpha^* v_\beta. \quad (2.56)$$

Wir merken an, dass sowohl $R(t)$ als auch S reelle Zahlen sind und ihre Summe nicht negativ sein kann.

Unter Benutzung folgender Abkürzung für das zeitliche Mittel beliebiger Funktionen $f(t)$

$$\langle f(t) \rangle_T := \int_0^T \frac{dt}{T} f(t), \quad (2.57)$$

findet man mittels Integration über (2.55), dass

$$\langle R(t) \rangle_T \leq \frac{1}{T} \sum_{\substack{\alpha, \beta \in \mathbb{G} \\ G_\alpha \neq G_\beta}} |v_\alpha^* v_\beta| \frac{2}{|G_\alpha - G_\beta|}. \quad (2.58)$$

Weil die Anzahl der Summanden endlich ist (vgl. (2.51)), können wir aus (2.54)-(2.58) schlussfolgern, dass für jedes gegebene $\epsilon > 0$ ein endliches T_ϵ existiert, so dass

$$\langle \tilde{\sigma}^2(t) \rangle_T \leq \epsilon + S \quad (2.59)$$

für alle $T \geq T_\epsilon$.

Als nächstes betrachten wir die Untermengen \mathbb{G}_j von \mathbb{G} aus (2.51), welche durch die Eigenschaft definiert werden, dass alle Elemente $\alpha = (m, n)$, die zu der selben Untermenge \mathbb{G}_j gehören, identische Energielücken $G_\alpha = E_m - E_n$ aufweisen, während für jedes Paar $\alpha \in \mathbb{G}_j$ und $\beta \in \mathbb{G}_k$ mit $j \neq k$ die entsprechenden Energielücken G_α sowie G_β verschieden sind. Es folgt, dass die Anzahl der Untermengen \mathbb{G}_j endlich ist ($j=1, \dots, J$), dass \mathbb{G} die disjunkte Vereinigung aller dieser Untermengen \mathbb{G}_j ist und dass jede Untermenge \mathbb{G}_j eine endliche Anzahl Elemente enthält, welche wir mit g_j bezeichnen wollen. Wir erinnern, dass g aus (2.11) die maximale Anzahl entarteter Energielücken bezeichnet, woraus

$$g_j \leq g \quad (2.60)$$

für alle j resultiert. Entsprechend können wir S aus (2.56) umschreiben zu

$$S = \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha, \beta \in \mathbb{G}_j} v_\alpha^* v_\beta. \quad (2.61)$$

Nun definieren wir das Skalarprodukt $\langle B | C \rangle := \sum_{k,l=1}^M B_{kl}^* C_{kl}$ für beliebige $M \times M$ Matrizen B und C . Für die spezielle Wahl $B_{kl} := x_k$ (unabhängig von l) sowie $C_{kl} := x_l$ (unabhängig von k) impliziert die Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\left| \sum_{k,l}^M x_k^* x_l \right|^2 \leq \sum_{k,l}^M |x_k|^2 \sum_{k,l}^M |x_l|^2 = \left(M \sum_k^M |x_k|^2 \right)^2 \quad (2.62)$$

für beliebige komplexe Zahlen x_1, \dots, x_M . Unter der Beobachtung, dass die letzte Summe in (2.61) genau von dieser Struktur ist, folgt mit (2.60), dass

$$S \leq \sum_{j=1}^J g_j \sum_{\alpha \in \mathbb{G}_j} |v_\alpha|^2 \leq g \sum_{j=1}^J \sum_{\alpha \in \mathbb{G}_j} |v_\alpha|^2 = g \sum_{\alpha \in \mathbb{G}} |v_\alpha|^2. \quad (2.63)$$

Kehren wir jetzt mittels (2.51) und (2.52) zu unserer ursprünglichen Notation zurück, erhalten wir

$$S \leq g \sum_{m \neq n}^N |A_{mn}|^2. \quad (2.64)$$

Diese Relation stellt zusammen mit (2.59) das zentrale Resultat dieses Abschnitts dar.

Schritt 3: In diesem Abschnitt werden wir uns erneut eng an das Vorgehen aus [17] halten. Mit \sum_1 bezeichnen wir die partielle Summe aus (2.64), die nur über alle Summanden mit $n = 1$ läuft. Unter Verwendung von (2.35) lässt sich diese dann ausdrücken als

$$\sum_1 := \sum_{m=2}^N |\tilde{A}_{m1}|^2 \leq \max_{n \geq 2} p_n W_1, \quad (2.65)$$

$$W_1 := \sum_{m=2}^N \text{Sp} \{ \rho_1 A P_m A \}. \quad (2.66)$$

Da $\rho_n A P_m A$ für beliebige m, n ein nicht-negativer Operator ist (siehe (2.19)), gilt

$$W_1 \leq \sum_{m,n} \text{Sp} \{ \rho_n A P_m A \} = \text{Sp} \left\{ \left(\sum_n \rho_n \right) A \left(\sum_m P_m \right) A \right\}, \quad (2.67)$$

wobei die die Summen über die volle, sprich nicht trunkierte, Spanne der m und n Werte läuft, wie in (2.1) und (2.3). Mit (2.8), (2.18) sowie (2.65) erreichen wir dann

$$\sum_1 \leq \max_{n \geq 2} p_n \text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \}. \quad (2.68)$$

Aus der Definition (2.25) lässt sich schließen, dass $\tilde{A}_{nm} = \tilde{A}_{mn}^*$. Daher kann man \sum_1 auch als den Teil der Summe in (2.64) ansehen, der über alle Summanden mit $m = 1$ läuft. Dies wiederum lässt uns (2.64) umformulieren zu

$$S \leq g \sum_1 + g \sum', \quad (2.69)$$

$$\sum' := \sum_{m=2}^N \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^N |\tilde{A}_{mn}|^2. \quad (2.70)$$

Analog zu (2.65)-(2.68) können wir auch \sum' von oben beschränken

$$\sum' \leq \max_{n \geq 2} p_n \text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \}. \quad (2.71)$$

Nur zum Zweck einer angenehmeren Notation haben wir bisher angenommen, dass die größte Besetzungswahrscheinlichkeit eines Energieniveaus durch p_1 gegeben ist (siehe (2.26)). Um diese unnötige Sonderrolle des Indizes $n = 1$ loszuwerden, benutzen wir (2.27) in (2.68) sowie (2.71). Damit ergibt sich für (2.69):

$$S \leq 2g \max'_n p_n \text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \}. \quad (2.72)$$

Dies ist das zentrale Resultat dieses Abschnitts.

Endergebnis: Als erstes betrachten wir den Fall $\text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} = 0$. Weil sowohl A^2 als auch alle Summanden in (2.8) hermitesche, nicht negative Operatoren sind, folgt

$$\text{Sp} \{ P_n \rho(0) P_n A^2 \} = 0 \quad (2.73)$$

für alle n . Ähnlich wie in (2.32) können wir das Betragsquadrat von (2.4) von oben beschränken:

$$\begin{aligned} |A_{mn}|^2 &= \left| \text{Sp} \left\{ \left(P_m \rho^{1/2} \right) \left(\rho^{1/2} P_n A \right) \right\} \right|^2 \\ &\leq \text{Sp} \{ P_m \rho(0) P_m \} \text{Sp} \{ P_n \rho(0) P_n A \}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Mit (2.73) findet man dann, dass $A_{mn} = 0$ für alle m, n , und mit (2.3), dass $\text{Sp} \{ \rho(t) A \} = 0$ für alle t . Ebenso findet man mit (2.8), dass $\text{Sp} \{ \bar{\rho} A \} = \sum_n A_{nn} = 0$. Somit ist (2.15) trivialerweise erfüllt.

Nun wenden wir uns dem Fall $\text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} > 0$ zu (da $\bar{\rho}$ und A^2 nicht negativ sind, existiert der Fall $\text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} < 0$ nicht). Deswegen wissen wir, dass

$$\beta := g \max'_n p_n \text{Sp} \{ \bar{\rho} A^2 \} > 0. \quad (2.75)$$

Zudem können wir D in (2.50) so wählen, dass $\delta^2(t) \leq \beta/20$ für alle t , womit

$$\langle \delta^2(t) \rangle_T \leq \beta/20 \quad (2.76)$$

für alle $T > 0$. Ferner können wir in (2.60) auch $\epsilon = \beta/20$ wählen, was zusammen mit (2.72) impliziert, dass

$$\langle \tilde{\sigma}^2(t) \rangle_T \leq 2.05 \beta \quad (2.77)$$

für alle hinreichend späten Zeiten T . Mit Blick auf (2.48) schließen wir, dass

$$\langle \sigma^2(t) \rangle_T = \langle \tilde{\sigma}^2(t) \rangle_T + 2V + \langle \delta^2(t) \rangle_T, \quad (2.78)$$

$$V := \langle \tilde{\sigma}(t) \delta(t) \rangle_T. \quad (2.79)$$

Unter der Anmerkung, dass $\langle f_1(t) f_2(t) \rangle_T$ für beliebige reellwertige Funktionen $f_{1,2}(t)$ ein wohldefiniertes Skalarprodukt darstellt, gibt die Cauchy-Schwarz Ungleichung

$$|V|^2 \leq \langle \tilde{\sigma}^2(t) \rangle_T \langle \delta^2(t) \rangle_T. \quad (2.80)$$

Mittels (2.76) sowie (2.77) folgt daraus $|V| \leq 0.4\beta$ und mit (2.78), dass

$$\langle \sigma^2(t) \rangle_T \leq 3\beta \quad (2.81)$$

für alle hinreichend späten T . Aufgrund von (2.58) sowie (2.75) lässt sich somit (2.15) zeigen.

2.2 Erweiterung auf allgemeine Unterscheidbarkeitsmaße

Bisher wurde, abgesehen von [15, 18], die (Un)unterscheidbarkeit von $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ immer hinsichtlich der korrespondierenden Erwartungswerte bezüglich einer Observable A untersucht. Wie durch Short [15] angemerkt wurde, ist ein solches Unterscheidbarkeitsmaß nicht zufriedenstellend, da quantenmechanische Messungen nicht in Erwartungswerten resultieren, sondern in Eigenwerten a_ν der Observable A .

Ähnlich wie in (2.1) lässt sich jede Observable A schreiben als

$$A = \sum_{\nu} a_{\nu} K_{\nu}, \quad (2.82)$$

wobei durch K_{ν} die Projektoren auf die disjunkten Eigenräume von A zu verschiedenen Eigenwerten a_{ν} bezeichnet werden. Gemäß der Lehrbuchmeinung über Quantenmechanik (Born'sche Regel)⁴ resultiert jede Messung eines Systems im Zustand $\rho(t)$ mittels der Observable A in einem der möglichen Messausgänge a_{ν} . Die korrespondierenden Wahrscheinlichkeiten einen spezifischen Messausgang a_{ν} zu erhalten sind gegeben durch

$$k_{\nu}(t) := \text{Sp} \{ \rho(t) K_{\nu} \}. \quad (2.83)$$

Zusätzlich merken wir an, dass unser Ansatz auch auf verallgemeinerte Messungen erweiterbar ist, sogenannte POVMs (positive operator valued measures). Der einzige formale Unterschied besteht darin, dass dann die entsprechenden Operatoren K_{ν} nicht länger orthogonal zueinander sind. Diese Eigenschaft werden wir im Folgenden aber nicht benötigen. Eine gelungene Einführung in die Funktionsweise und Notwendigkeit von POVMs gibt beispielsweise [22]. POVMs werden immer dann relevant, wenn man die Messung nicht am System direkt, sondern an einem damit verschränkten Hilffsystem durchführt. Aufgrund unserer „Einschränkung“ auf ein realistisches Verhältnis von Messbereich Δ_A zu

⁴Nach der Überzeugung des Autors ist diese Lehrmeinung, welche mit der Kopenhagener Interpretation einen willkürlichen und nicht unitären Kollaps der Wellenfunktion einführt, inkonsistent sowie überholt, wenn auch nichtsdestotrotz in vielen Situationen eine gute Approximation. Der interessierte Leser wird zur weiterführenden Lektüre auf [21] verwiesen.

experimenteller Auflösung δA (siehe (2.5)) betrachten wir weiterhin grobkörnige Observablen A , für die gilt

$$\nu \in \{1, 2, \dots, N_A\}, \quad N_A < 10^{20}. \quad (2.84)$$

Aus obigen Gründen sollte die Unterscheidbarkeit von $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ auf Basis der wirklich beobachteten, zufällig auftretenden Messausgänge a_ν beurteilt werden. Genauer gesagt ist ein geeigneter Weg zu finden, um die Wahrscheinlichkeiten $k_\nu(t)$ sowie

$$\bar{k}_\nu := \text{Sp} \{ \bar{\rho} K_\nu \}, \quad (2.85)$$

mit denen die Messausgänge a_ν in den jeweiligen Zuständen $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ auftreten, zu vergleichen. In der Tat könnte es der Fall sein, dass $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ hinsichtlich des Erwartungswertes von A ununterscheidbar sind, während sie bezüglich der relativen Häufigkeiten der Messausgänge a_ν , unter hinreichend häufiger Wiederholung des Experiments, sehr wohl mit merklicher statistischer Signifikanz unterscheidbar sind.

Hier und auch im Folgenden verstehen wir, wie üblich, unter einer Wiederholung eines Experiments, dass die Messung der selben Observable auf einem Ensemble an Systemen im gleichen Quantenzustand⁵ durchgeführt wird, wobei sie nach der Born'schen Regel jedes Mal in einem zufälligen Messausgang resultiert.

Anders gesagt besteht die Problematik der Equilibration darin zu zeigen, dass die Häufigkeiten, mit denen die unterschiedlichen Messausgänge im wahren Systemzustand $\rho(t)$ vorkommen, nicht statistisch signifikant inkompatibel mit der Approximation $\bar{\rho}$ sind.

In der Formulierung dieser Problematik haben wir t stillschweigend als beliebig aber fest aufgefasst. Am Ende dieses Kapitels werden wir unser Ergebnis auf die realistischen Fälle, in denen die Messung in jeder Wiederholung zu einer unterschiedlichen Zeit durchgeführt wird, erweitern.

Im Sinne unserer Einschränkung auf physikalisch realistische Observablen A beschränken wir uns auch auf eine realistische Anzahl an Wiederholungen der Messung

$$N_{rep} < 10^{30}. \quad (2.86)$$

Diese Schranke wird durch 10^{12} Wiederholungen pro Sekunde seit dem Urknall erreicht. Man kann leicht verstehen, warum eine solche obere Schranke notwendig ist. Dafür betrachten wir den generischen Fall, dass die Wahrscheinlichkeiten (2.83) und (2.85) nicht für alle ν identisch sind. Im Limes $N_{rep} \rightarrow \infty$ muss dann mit beliebiger statistischer Signifikanz deutlich werden, dass die Approximation $\bar{\rho}$ inkompatibel mit den beobachteten Messausgängen ist, welche ihren Ursprung im wahren Systemzustand $\rho(t)$ haben. Mit anderen Worten wären die Zustände $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ ohne realistische Beschränkung von N_{rep} im generischen Fall immer unterscheidbar.

⁵Durch die Zulässigkeit gemischter Dichtematrizen in unserem Ansatz, welche die Inkorporation klassischer Unsicherheit/Unkenntnis in die Quantenmechanik erlauben, ist diese Annahme gerechtfertigt.

Erste wichtige Schritte zur Auflösung dieser präzisierten Equilibrationsproblematik wurden in [15] unternommen. Dort wurde die Unterscheidbarkeit von $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ folgendermaßen quantifiziert: Wir stellen uns vor, dass jeweils mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ einer der Zustände $\rho(t)$ oder $\bar{\rho}$ ausgewählt wird und dann auf Basis dessen ein Messergebnis a_ν mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten (2.83) oder (2.85) gewonnen wird. Nun ist es unsere Aufgabe mittels des beobachteten a_ν zu erraten, welcher Zustand, $\rho(t)$ oder $\bar{\rho}$, ausgewählt wurde. Die Wahrscheinlichkeit, dass wir mit unserer Vermutung richtig liegen, ist durch $1/2 + \sum_{\nu=1}^{N_A} |k_\nu(t) - \bar{k}_\nu|/4$ beschränkt, wie in [15] gezeigt wurde. Diese Größe wurde dort dann zur Quantifizierung der Unterscheidbarkeit von $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ durch A verwendet.

Aus zwei Gründen denken wir, dass das Vorgehen aus [15] noch nicht vollständig befriedigend ist: (i) Das oben beschriebene „Raten“ von zufälligen Zuständen entspricht nicht der wirklichen experimentellen Equilibrationsproblematik, wo die Messausgänge immer durch $\rho(t)$ erzeugt werden und nicht durch entweder $\rho(t)$ oder $\bar{\rho}$ mit gleichen Wahrscheinlichkeiten. (ii) Zudem ist der ganze Ansatz auf nur eine Wiederholung $N_{rep} = 1$ des Experimentes beschränkt. Im Gegensatz zu (2.86) ist diese Einschränkung nicht experimentell realistisch. Warum [18] für unsere Fragestellung nicht abschließend zufriedenstellend ist, wird dem Leser am Ende dieses Kapitels leichter ersichtlich. Denn dort fehlt der Nachweis des besten Unterscheidbarkeitsmaßes und das benutzte Maß ist im Sinne von (2.97) parteiisch; beide Aspekte werden im Folgenden diskutiert.

Unser Hauptziel in diesem Kapitel ist ein Ansatz, der auch bezüglich der vorhergehenden Kritik zufriedenstellend ist. Des Weiteren werden wir als zusätzliche Verallgemeinerung in jeder Wiederholung j auch unterschiedliche Observablen A_j zulassen (hierbei bleibt der Systemzustand jedoch weiterhin der gleiche in jeder Wiederholung (siehe Fußnote 5)). Natürlich können im speziellen auch weiterhin alle A_j identisch sein; im allgemeinen Fall sind jetzt aber auch unterschiedliche A_j zulässig. Deshalb führen wir, analog zu (2.82), Projektoren $K_\nu^{(j)}$ auf die Eigenräume von A_j ein sowie die entsprechenden Eigenwerte $a_\nu^{(j)}$, wobei nun $\nu \in \{1, 2, \dots, N_{A_j}\}$. In Analogie zu (2.83) sowie (2.85) definieren wir ebenso die Wahrscheinlichkeiten

$$k_\nu^{(j)}(t) := \text{Sp} \left\{ \rho(t) K_\nu^{(j)} \right\}, \quad (2.87)$$

$$\bar{k}_\nu^{(j)} := \text{Sp} \left\{ \bar{\rho} K_\nu^{(j)} \right\}. \quad (2.88)$$

Dementsprechend kann das Ergebnis unserer N_{rep} Messungen eindeutig durch einen N_{rep} -dimensionalen Vektor \vec{s} spezifiziert werden, dessen j -te Komponente $s_j \in \{1, \dots, N_{A_j}\}$ wiedergibt, welcher Messausgang $a_\nu^{(j)}$ von A_j in der j -ten Messung realisiert wurde. Die Wahrscheinlichkeit das Messergebnis \vec{s} zu erhalten ist damit gegeben durch

$$p_t(\vec{s}) := \prod_{j=1}^{N_{rep}} k_{s_j}^{(j)}(t) \quad (2.89)$$

für das System im Zustand $\rho(t)$, während sie bezüglich $\bar{\rho}$

$$\bar{p}(\vec{s}) := \prod_{j=1}^{N_{rep}} \bar{k}_{s_j}^{(j)} \quad (2.90)$$

lautet. Abschließend können wir mit der Definition

$$N_{obs} := \max_j N_{A_j} \quad (2.91)$$

aus (2.84) herleiten, dass

$$N_{A_j} \leq N_{obs} < 10^{20} \quad (2.92)$$

für alle $j = 1, \dots, N_{rep}$.

Mit den nun eingeführten Definitionen lässt sich die, von uns zu lösende, Problematik folgendermaßen zusammenfassend formulieren: Es gibt einen wahren Zustand $\rho(t)$, mit t beliebig aber fest, und einen approximativen Zustand $\bar{\rho}$. Dann wird das System im Zustand $\rho(t)$ in N_{rep} Messdurchläufen bezüglich der Observablen A_j ($j = 1, \dots, N_{rep}$) untersucht. Dies resultiert in einem der möglichen Messergebnisse \vec{s} . In diesem Kontext ist jetzt die zentrale Fragestellung, ob das beobachtete Messergebnis \vec{s} einer solchen Messreihe merklich schlechter durch die Approximation $\bar{\rho}$ als durch den wirklichen Zustand $\rho(t)$ beschrieben wird oder ob sowohl $\rho(t)$ als auch $\bar{\rho}$ mit den Messdaten \vec{s} gleichermaßen, gut oder schlecht, kompatibel sind. Wenn letzteres unter häufiger Wiederholung der gesamten Messreihe, sprich jedes Messergebnis wird mit Wahrscheinlichkeit $p_t(\vec{s})$ aus (2.89) realisiert, mit hoher Wahrscheinlichkeit der Fall ist, dann sind die beiden Zustände $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ durch Messung der Observablen A_j praktisch nicht zu unterscheiden. Anders gesagt ist die Approximation $\bar{\rho}$ von bestmöglicher Güte, da sie die beobachteten Messergebnisse praktisch so gut wie der wahre Zustand $\rho(t)$, der gleichzeitig der bestmöglichen Theorie entspricht, beschreibt.

Um diesem Konzept mehr Substanz zu verleihen, konzentrieren wir uns auf einen beliebigen, aber festen „Test“ (beziehungsweise eine „Regel“, ein „Kriterium“, eine „Strategie“, ...), durch den wir quantifizieren können, wie viel schlechter (oder besser) die Approximation $\bar{\rho}$ im Vergleich zu $\rho(t)$ mit dem betrachteten Datensatz \vec{s} kompatibel ist. Alle Wahrscheinlichkeiten aus (2.89) sowie (2.90) werden dafür in diesen Test einfließen. Mit anderen Worten stellen $\rho(t)$, $\bar{\rho}$ und \vec{s} den Input des Tests dar, welcher dann als „black box“ agiert und einen Output in Form einer reellen Zahl $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ liefert.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir an, dass $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ standardisiert ist und somit nur Werte im Intervall $[-1, 1]$ annimmt. Des Weiteren indiziert $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) = 0$, dass $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ gleich gut (oder schlecht) mit \vec{s} kompatibel sind. Schließlich gilt, dass mit höherem positiven q die Messergebnisse zunehmend besser durch $\rho(t)$ als durch $\bar{\rho}$ erklärt werden und umgekehrt für negative q . Negative q sind unwahrscheinlich aber nicht unmöglich. Intuitiv (oder vom Bayes'schen Gesichtspunkt aus) erscheint es plausibel, dass diese Fälle realisiert werden wann immer ein Messausgang \vec{s} mit der Eigenschaft $\bar{p}(\vec{s}) > p_t(\vec{s})$ vorliegt.

Wir können niemals „100%“ sicher sein, dass $\bar{\rho}$ inkompatibel mit den Messdaten ist.⁶ Daher kann jeder Test nur bestimmte wahrscheinlichkeitstheoretische Aussagen (basierend auf einer gewissen Auffassung von Wahrscheinlichkeit, Plausibilität, Konfidenz,...) über die Kompatibilität von $\bar{\rho}$ mit \vec{s} treffen und ebenso für $\rho(t)$.

Ein besonders einfaches Beispiel ist

$$q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) := f[p(\rho(t)|\vec{s}) - p(\bar{\rho}|\vec{s})], \quad (2.93)$$

$$p(\rho(t)|\vec{s}) := \frac{p_t(\vec{s})}{p_t(\vec{s}) + \bar{p}(\vec{s})}, \quad (2.94)$$

$$p(\bar{\rho}|\vec{s}) := \frac{\bar{p}(\vec{s})}{p_t(\vec{s}) + \bar{p}(\vec{s})}, \quad (2.95)$$

wobei $f[x]$ eine monoton wachsende Funktion von x mit $f[-1] = -1$, $f[0] = 0$ und $f[1] = 1$ ist; beispielsweise $f[x] = x$. [Wir können uns natürlich auf Messausgänge \vec{s} mit nicht verschwindender Wahrscheinlichkeit beschränken, womit die Nenner in (2.94) sowie (2.95) ungleich Null sind. Ebenso bemerken wir, dass die rechte Seite von (2.93) mit $p(\bar{\rho}|\vec{s}) = 1 - p(\rho(t)|\vec{s})$ auch als Funktion von $p(\rho(t)|\vec{s})$ allein geschrieben werden kann.] Im Bayes'schen Kontext können $p(\rho(t)|\vec{s})$ sowie $p(\bar{\rho}|\vec{s})$ in (2.94) und (2.95) mit den bedingten Wahrscheinlichkeiten für $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ gegeben \vec{s} identifiziert werden, unter der Annahme gleicher a-priori Wahrscheinlichkeiten für $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ (also bevor die Beobachtung \vec{s} verfügbar war). Daher kann (2.93) als Quantifizierung der Wahrscheinlichkeit für $\rho(t)$ im Vergleich zu der für $\bar{\rho}$ interpretiert werden. Nichtsdestotrotz betonen wir, dass auch ohne diesen Bayes'schen Gesichtspunkt alle Größen in (2.93)-(2.95) wohl definiert bleiben und eine vernünftige wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation zulassen.

Kehren wir nun zu dem allgemeinen Fall eines beliebigen, aber festen Tests zurück. Unsere erste zentrale Hypothese ist, dass für jeden dieser Tests eine Funktion q gewählt werden kann, so dass die Qualität dieses Tests vernünftig durch das Maß der Unterscheidbarkeit

$$Q(t) := \sum_{\vec{s}} p_t(\vec{s}) q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) \quad (2.96)$$

quantifiziert wird; d.h. durch die Mittlung aller $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ über die experimentell möglichen Messausgänge \vec{s} unter Gewichtung mit den entsprechenden Realisierungswahrscheinlichkeiten $p_t(\vec{s})$. Genauer gesagt postulieren wir die Existenz wenigstens einer solchen Funktion q , für welche ein Q -Wert nahe Eins eine relativ zuverlässige Unterscheidbarkeit von $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ durch den Test signalisiert, während ein Q -Wert nahe Null indiziert, dass mittels des Tests kein signifikanter Unterschied zwischen dem wahren Systemzustand $\rho(t)$ und der Approximation $\bar{\rho}$ erkennbar ist.

⁶Auf den ersten Blick könnte man denken, dass $\bar{p}(\vec{s}) = 0$ mit Sicherheit eine Inkompatibilität von $\bar{\rho}$ mit den Daten \vec{s} bedeutet. Aber in Appendix 2.1.1 unterhalb von Gl. (2.74) wurde gezeigt, dass $\bar{p}(\vec{s}) = 0$ umgehend $p_t(\vec{s}) = 0$ impliziert; sprich ein solches \vec{s} wird nie realisiert.

Die Menge aller Tests, welche unsere obigen Annahmen erfüllt, lässt aber weiterhin unerwünscht parteiische Funktionen q zu. Das einfachste Beispiel ist $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) := 1$ für alle \vec{s} ; was in dem höchst möglichen $Q(t) = 1$ resultiert. Der einzig praktikable Ausweg scheint nur solche Funktionen q zu zulassen, die nicht von der Information Gebrauch machen, dass die Messdaten \vec{s} durch $\rho(t)$ generiert wurden. Insbesondere können wir uns (als hypothetisches Gedankenexperiment) vorstellen, dass sich das System im Zustand $\bar{\rho}$ und nicht im Zustand $\rho(t)$ befindet, ohne dass dies der Person, welche mit einer gegebenen Funktion q arbeitet, bewusst ist. Dann würden die Messreihen \vec{s} durch $\bar{\rho}$ und nicht durch $\rho(t)$ generiert, was dazu führen sollte, dass genau die selbe Funktion q nun (im Mittel) eine bessere Vereinbarkeit der Messdaten \vec{s} mit $\bar{\rho}$ anstatt mit $\rho(t)$ bescheinigt.

Daher lautet unsere zweite zentrale Hypothese, dass es ausreichend ist sich auf Tests zu fokussieren, welche die folgende zusätzliche Symmetrieeigenschaft besitzen: wir stellen uns viele Wiederholungen unserer betrachteten Messreihe vor⁷. Aber jetzt wird in jeder Wiederholung die Messreihe mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ durch entweder $\rho(t)$ oder durch $\bar{\rho}$ generiert (entsprechend der Wahrscheinlichkeiten in (2.89) sowie (2.90)). In dieser Situation fordern wir von unserer Funktion q , dass sie unparteiisch ist; d.h.

$$\sum_{\vec{s}} \frac{p_t(\vec{s}) + \bar{p}(\vec{s})}{2} q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) = 0. \quad (2.97)$$

Obwohl die beiden obigen Hypothesen wohl nur schwer, wenn überhaupt, aus noch fundamentaleren Prinzipien ableitbar sind, so erscheinen sie doch sehr plausibel und werden daher im Weiteren vorausgesetzt. Vor allem implizieren sie, wie wir in Anhang 2.2.1 demonstrieren, die generelle obere Schranke

$$|Q(t)| \leq Q_{\max}(t) := \frac{1}{2} \sum_{\vec{s}} |p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})| \quad (2.98)$$

für das Unterscheidbarkeitsmaß $Q(t)$ aus (2.96), und das unabhängig von spezifischen Eigenschaften des betrachteten Tests oder der zugehörigen q -Funktion.

Beispielsweise kann man umgehend zeigen, dass das Exempel aus (2.93)-(2.95) mit $f[x] = x$ der Symmetrie (2.97) sowie der Schranke (2.98) genügt. Im Allgemeinen führt die Symmetrie (2.97) zu einer nicht trivialen Einschränkung von q und die Schranke (2.98) ist ohne Verweis auf 2.2.1 schwer zu verifizieren.

Im Rückblick erscheint unser Anspruch, generell die Kompatibilität von $\bar{\rho}$ mit der Messreihe \vec{s} im Vergleich zu $\rho(t)$ zu quantifizieren, in Anbetracht der vielen möglichen Umsetzungen nur schwer zu erfüllen. Aufgrund dessen macht die Unabhängigkeit unseres Resultats (2.98) von konkreten Details der möglichen Kompatibilitätstest eben dieses so reizvoll. Die einzigen, sehr schwachen und

⁷Der Leser beachte bitte den subtilen, aber essentiellen Unterschied zwischen Wiederholungen einer gesamten Messreihe und Wiederholungen von Messungen innerhalb einer solchen Messreihe.

plausiblen Voraussetzungen sind, dass alle betrachteten Unterscheidbarkeitsmaße in der Form (2.96) ausgedrückt werden können und dass sie die Symmetrie (2.97) respektieren.

Das Fazit der vorhergehenden Überlegungen lautet: Falls es uns gelingt zu zeigen, dass $Q_{\max}(t)$ aus (2.98) eine kleine Größe ist, dann ist es experimentell nicht praktikabel eine statistisch signifikante Abweichung der Approximation $\bar{\rho}$ vom wahren Systemzustand $\rho(t)$ nachzuweisen. Diese Aussage gilt für einen beliebigen, aber festen Zeitpunkt t sowie eine beliebige, aber feste Messreihe $A_1, \dots, A_{N_{rep}}$. Wenn wir beweisen können, dass die selbe Aussage für alle Messreihen, welche (2.86) sowie (2.92) genügen, simultan und für die überwiegende Mehrheit aller hinreichend späten Zeiten t hält, dann kann die Approximation von $\rho(t)$ durch $\bar{\rho}$ als perfekt für alle praktischen Zwecke betrachtet werden.

In Anhang 2.2.2 wird der entsprechende Beweis geführt. Von der Form ist das Resultat dem aus Gleichungen (2.12) sowie (2.14) in Kap. 2.1 ähnlich und lautet

$$T^*/T \leq \epsilon, \quad (2.99)$$

$$T^* := |\{0 \leq t \leq T : Q_{\max}(t) > \epsilon\}|, \quad (2.100)$$

$$\epsilon := \left(122 g \max'_n p_n\right)^{1/4} N_{obs}^{1/2} N_{rep} \quad (2.101)$$

für alle hinreichend späten T . Dies ist das abschließende Resultat dieses Kapitels. Nicht nur die Form sondern auch die Diskussion dieses Ergebnisses ähnelt der aus 2.1. Darum rekapitulieren wir hier nur die zentralen Punkte: In (2.101) bezeichnet g die maximale Entartung der Energielücken aus (2.11); wobei $g = 1$ ist für Hamiltonoperatoren mit einem generischen Spektrum. Des Weiteren entspricht $\max'_n p_n$ der zweitgrößten Besetzungswahrscheinlichkeit eines Energieniveaus und ist nach (2.7) typischerweise exponentiell klein in f für ein System mit $f \gg 1$ Freiheitsgraden. In Anbetracht von (2.86) sowie (2.92) können wir folgern, dass ϵ in (2.101) bereits für Systeme mit mehr als 10^3 Freiheitsgraden eine extrem kleine Zahl ist. Im Umkehrschluss ist das Lebesgue-Maß (2.100) der Zeiten, für welche möglicherweise eine nicht zu vernachlässigende Chance besteht eine auflösbare Differenz zwischen $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ mittels eines geeigneten Verfahrens zu beobachten, gemäß (2.99) vernachlässigbar klein im Vergleich zu allen Zeiten $t \in [0, T]$, solange T hinreichend groß ist.

Dadurch dass wir in jeder Wiederholung eine unterschiedliche Observable A_j zulassen, deckt unser Ansatz bereits den Fall von Messungen zu unterschiedlichen Zeitpunkten in jeder Wiederholung mit ab. Der Grund liegt in der bekannten Äquivalenz von Schrödinger- und Heisenberg-Bild. Eine Erweiterung, die nicht durch unseren Ansatz abgedeckt ist, die aber auch physikalisch über das Lehrbuchverständnis von Equilibration hinaus geht, betrifft die quantenmechanische, simultane Messung von identisch präparierten, nicht wechselwirkenden Systemen. Dieser Typ von Messung ist nach [23, 24] dem hier behandelten, in Form von zeitlich disjunkten Messwiederholungen, überlegen. Unserer Auffassung nach scheint eine entsprechende Erweiterung aber prinzipiell möglich.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass $\bar{\rho}$ den wahren Systemzustand $\rho(t)$ nahezu perfekt für alle hinreichend späten Zeiten t approximiert. Die be-

obachtbaren Unterschiede sind entweder nicht auflösbar oder vernachlässigbar selten. Damit ist die Ausgangsfrage dieses Kapitels nach der Equilibration von quantenmechanischen Vielteilchensystemen beantwortet. Die hier dargelegten Überlegungen zu allgemeinen Unterscheidbarkeitsmaßen zwischen zwei statistischen Vorhersagen erscheinen dem Autor, nach der für diese Arbeit getätigten Recherche, auch über unsere Fragestellung hinaus generell von Relevanz zu sein. Gleiches gilt für die Technik zur Reduktion des Hilbertraums in 2.1.1 auf die Dimensionen mit relevanten Besetzungen p_n der Energielevel E_n . Trotz der diskutierten Unzulänglichkeiten von Erwartungswerten zur Unterscheidbarkeit zweier Quantenzustände werden wir aus Gründen der kompakteren Darstellbarkeit diese im Rest der Arbeit wieder nutzen. Da eine Ununterscheidbarkeit bezüglich von Erwartungswerten die technische Grundlage für eine allgemein gültige Ununterscheidbarkeit ist (siehe Anhang 2.2.2), gehen wir davon aus, dass die folgenden Resultate sich entsprechend verallgemeinern lassen.

2.2.1 Anhang 2.B

In diesem Anhang werden wir die Schranke (2.98) durch eine Verallgemeinerung des Ansatzes von Short aus [15] herleiten. Wir stellen uns viele Wiederholungen unserer Messreihe aus dem vorherigen Kapitel 2.2 vor. Wie schon oberhalb von (2.97) wird in jeder Wiederholung die Messreihe \vec{s} mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ durch entweder $\rho(t)$ oder $\bar{\rho}$ generiert (entsprechend der Wahrscheinlichkeiten in (2.89) sowie (2.90)). Aber im Gegensatz zu Kapitel 2.2 lautet die Aufgabe nun in jeder Wiederholung zu raten, ob die entsprechenden Messdaten \vec{s} durch $\rho(t)$ oder $\bar{\rho}$ generiert wurden.

Diese Fragestellung verallgemeinert die von Short in [15] formulierte, welche wir auch kurz zu Beginn von Kap. 2.2 problematisiert haben. In vielerlei Hinsicht ist sie auch ähnlich zu unserer zentralen Fragestellung aus 2.2. Allerdings ist es essentiell anzumerken, dass sie nicht identisch ist und quantitative Aussagen in dem einen Fall sich nicht umgehend auf rigorose Schlussfolgerungen in dem anderen übertragen lassen. Solche rigorosen Schlussfolgerungen sind jedoch auch nicht unmöglich, wie wir jetzt darlegen werden.

Eine zentrale Beobachtung ist, dass das hier spezifizierte Problem den zwei „Modellen“ $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ wohldefinierte, objektive Wahrscheinlichkeiten zuordnet, nämlich $\frac{1}{2}$. In der Konsequenz stimmen der konventionelle wahrscheinlichkeitstheoretische Ansatz und der nach Bayes in diesem speziellen Fall überein.

Mit anderen Worten wird uns in jeder Wiederholung der Messreihe ein Datensatz \vec{s} gegeben und wir haben die volle Kenntnis über $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$ zur Verfügung, aber nicht mehr. Jetzt müssen wir auf Basis dieser Informationen eine Entscheidung treffen. Auf der Hand liegt, dass für jedes gegebene \vec{s} nur die Information $p_t(\vec{s})$ sowie $\bar{p}(\vec{s})$ aus (2.89) sowie (2.90) von Nutzen ist. Offensichtlich oder durch Verweis auf das Bayes'sche Konzept lautet die beste Entscheidungsregel für $\rho(t)$ zu stimmen, falls $p_t(\vec{s}) > \bar{p}(\vec{s})$, und umgekehrt. Für den Fall $p_t(\vec{s}) = \bar{p}(\vec{s})$ führen wir eine dritte Option, namens „unentschieden“, ein (alternativ könnte man auch mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ für eine der anderen beiden stimmen). Zählen wir eine richtige Entscheidung als 1 und eine falsche als -1 ,

lässt sich die Wahrscheinlichkeit einer richtigen Entscheidung P^{erfolg} mittels der optimalen Entscheidungsregel schreiben als

$$P_{opt}^{erfolg} = \sum_{\vec{s}} \left[\frac{p_t(\vec{s})}{2} \frac{1 + q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})}{2} + \frac{\bar{p}(\vec{s})}{2} \frac{1 - q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})}{2} \right], \quad (2.102)$$

$$q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) := \begin{cases} 1 & \text{falls } p_t(\vec{s}) > \bar{p}(\vec{s}) \\ -1 & \text{falls } p_t(\vec{s}) < \bar{p}(\vec{s}) \\ 0 & \text{falls } p_t(\vec{s}) = \bar{p}(\vec{s}). \end{cases} \quad (2.103)$$

Dies kann man folgendermaßen im Detail begründen: Der erste Faktor $p_t(\vec{s})/2$ in (2.102) repräsentiert die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $(\rho(t), \vec{s})$. Der zweite $[1 + q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})]/2$ gibt Eins im Falle einer richtigen Entscheidung, Null im Falle einer falschen und $\frac{1}{2}$ falls wir unentschieden waren (oder zufällig eine der beiden anderen Optionen gewählt haben). Ähnliche Betrachtungen lassen sich für den zweiten Summanden in (2.102) anstellen.

Da $\sum_{\vec{s}} p_t(\vec{s}) = \sum_{\vec{s}} \bar{p}(\vec{s}) = 1$, folgt umgehend aus (2.102), dass

$$P_{opt}^{erfolg} = \frac{1}{2} + \sum_{\vec{s}} \frac{p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})}{4} q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}). \quad (2.104)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir die Summe auf Summanden mit $p_t(\vec{s}) \neq \bar{p}(\vec{s})$ beschränken. Dann schreiben wir $q_{opt}(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ aus (2.103) zu $|p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})| / \{p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})\}$ um, womit gilt

$$P_{opt}^{erfolg} = \frac{1}{2} + \sum_{\vec{s}} \frac{|p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})|}{4}. \quad (2.105)$$

Als Nächstes betrachten wir die identische Fragestellung, aber benutzen eine beliebige q -Funktion aus Kap. 2.2: Wenn $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) \geq 0$, dann entscheiden wir uns mit Wahrscheinlichkeit $p_+ := q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ für $\rho(t)$ und mit Wahrscheinlichkeit $1 - p_+$ sind wir unentschieden, sprich wählen zufällig zwischen $\rho(t)$ und $\bar{\rho}$. Entsprechend entscheiden wir uns, falls $q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}) < 0$, mit Wahrscheinlichkeit $p_- := -q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})$ für $\bar{\rho}$ und mit Wahrscheinlichkeit $1 - p_-$ sind wir unentschieden. Ähnlich wie (2.102) kann die Erfolgswahrscheinlichkeit dieser Entscheidungsregel als

$$P^{erfolg} = \sum_{\vec{s}} \left[\frac{p_t(\vec{s})}{2} \frac{1 + q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})}{2} + \frac{\bar{p}(\vec{s})}{2} \frac{1 - q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s})}{2} \right] \quad (2.106)$$

ausgedrückt werden und wie in (2.104) folgt

$$P^{erfolg} = \frac{1}{2} + \sum_{\vec{s}} \frac{p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})}{4} q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}). \quad (2.107)$$

Auf der anderen Seite, wenn man (2.97) von (2.96) subtrahiert, erhält man

$$Q(t) = \sum_{\vec{s}} \frac{p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})}{2} q(\rho(t), \bar{\rho}, \vec{s}). \quad (2.108)$$

Durch den Vergleich mit (2.107) findet man dann $P^{erfolg} = [1 + Q(t)]/2$. Da diese Erfolgswahrscheinlichkeit die optimale aus (2.105) nicht überschreiten kann, gilt $[1 + Q(t)]/2 \leq P_{opt}^{erfolg}$. GleichermäÙen ergibt sich durch die Wahl von $-q(\rho(t), \bar{\rho}, \bar{s})$ anstatt $q(\rho(t), \bar{\rho}, \bar{s})$ für die Entscheidungsregel, dass $[1 - Q(t)]/2 \leq P_{opt}^{erfolg}$. Kombiniert implizieren diese beiden Ungleichungen $[1 + |Q(t)|]/2 \leq P_{opt}^{erfolg}$; was wiederum mit (2.105) unser angestrebtes Resultat (2.98) zur Folge hat.

Wir betonen, dass wir zwar in der Herleitung von (2.98) ein andere Fragestellung als die aus Kap. 2.2 betrachtet haben, die so gewonnene Ungleichung (2.98) aber nichtsdestotrotz mathematisch, unabhängig von der spezifischen Fragestellung, Gültigkeit besitzt.

2.2.2 Anhang 2.C

In diesem Anhang legen wir die Herleitung von (2.99)-(2.101) dar. Betrachtet man einen beliebigen der Projektoren $K_\nu^{(j)}$ aus (2.87) sowie (2.88) und ersetzt A durch $K_\nu^{(j)}$ in (2.10)-(2.13), so findet man umgehend für jedes $\epsilon_\nu^{(j)}$, dass

$$T_\nu^{(j)}/T \leq \alpha \text{Sp} \left\{ \bar{\rho} \left[K_\nu^{(j)} \right]^2 \right\} \left[\epsilon_\nu^{(j)} \right]^{-2} = \alpha \bar{k}_\nu^{(j)} \left[\epsilon_\nu^{(j)} \right]^{-2} \quad (2.109)$$

für alle hinreichend späten T , wobei

$$\alpha := 2g \max'_n p_n, \quad (2.110)$$

$$T_\nu^{(j)} := \left| \left\{ 0 \leq t \leq T : \left| \sigma_\nu^{(j)}(t) \right| > \epsilon_\nu^{(j)} \right\} \right|, \quad (2.111)$$

$$\sigma_\nu^{(j)}(t) := \left\langle K_\nu^{(j)} \right\rangle_{\rho(t)} - \left\langle K_\nu^{(j)} \right\rangle_{\bar{\rho}} = k_\nu^{(j)}(t) - \bar{k}_\nu^{(j)}. \quad (2.112)$$

Für jedes gegebene Tupel (j, ν) (mit $j \in \{1, \dots, N_{rep}\}$ sowie $\nu \in \{1, \dots, N_{A_j}\}$) und jedes $\epsilon_\nu^{(j)} > 0$ bezeichnet die Größe $T_\nu^{(j)}$ das Lebesgue-MaÙ aller Zeitpunkte $t \in [0, T]$, für welche $\left| \sigma_\nu^{(j)}(t) \right| > \epsilon_\nu^{(j)}$ gilt. Dementsprechend kann das MaÙ aller Zeitpunkte $t \in [0, T]$, für die $\left| \sigma_\nu^{(j)}(t) \right| > \epsilon_\nu^{(j)}$ für wenigstens ein Tupel (j, ν) , von oben abgeschätzt werden durch

$$T_{tot} := \sum_{j=1}^{N_{rep}} \sum_{\nu=1}^{N_{A_j}} T_\nu^{(j)} \quad (2.113)$$

für alle hinreichend späten T . Für die übrigen Zeitpunkte $t \in [0, T]$ gilt $\left| \sigma_\nu^{(j)}(t) \right| < \epsilon_\nu^{(j)}$ simultan für alle Tupel (j, ν) . Auf eben diese Untermenge von $[0, T]$ möchten wir uns im Folgenden konzentrieren, sprich auf Zeiten t , für die

$$\left| \sigma_\nu^{(j)}(t) \right| < \epsilon_\nu^{(j)} \forall j \in \{1, \dots, N_{rep}\}, \nu \in \{1, \dots, N_{A_j}\}. \quad (2.114)$$

Im Umkehrschluss ist das Lebesgue-Maß aller Zeitpunkte $t \in [0, T]$, für welche aus (2.114) abgeleitete Implikationen möglicherweise nicht gelten, durch T_{tot} aus (2.113) beschränkt.

Wie sich herausstellen wird, ist die folgende Wahl der Größen $\epsilon_\nu^{(j)}$ besonders günstig

$$\epsilon_\nu^{(j)} := \bar{k}_\nu^{(j)} F / N_{rep} \text{ falls } \bar{k}_\nu^{(j)} > k_{sw}, \quad (2.115)$$

$$\epsilon_\nu^{(j)} := \left(k_{sw} \bar{k}_\nu^{(j)} \right)^{1/2} F / N_{rep} \text{ falls } k_{sw} \geq \bar{k}_\nu^{(j)} > 0, \quad (2.116)$$

$$\epsilon_\nu^{(j)} := k_{sw} F / N_{rep} \text{ falls } \bar{k}_\nu^{(j)} = 0, \quad (2.117)$$

wobei der Faktor F und der Schwellwert k_{sw} positive, reelle Zahlen sind, deren explizite Werte später fixiert werden. Für den Moment fordern wir nur

$$0 < F \leq 1/2. \quad (2.118)$$

Führen wir (2.115)-(2.117) in (2.109) sowie (2.113) ein, impliziert dies für hinreichend späte T

$$\frac{T_{tot}}{T} \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \sum_{\nu=1}^{N_{A_j}} \alpha \frac{N_{rep}^2}{F^2 k_{sw}}. \quad (2.119)$$

Unter Ausnutzung von (2.91) kann die Anzahl der Summanden in der Doppelsumme durch $N_{rep} N_{obs}$ beschränkt werden. Dies resultiert in

$$\frac{T_{tot}}{T} \leq \alpha \frac{N_{obs} N_{rep}^3}{F^2 k_{sw}} =: \epsilon \quad (2.120)$$

für alle hinreichend späten T .

Mit Verweis auf die Notation $\vec{s} := (s_1, \dots, s_{N_{rep}})$, welche unterhalb von (2.88) eingeführt wurde, teilen wir die Menge aller möglichen Messausgänge

$$S := \{ \vec{s} : s_j \in \{1, \dots, N_{A_j}\}, j \in \{1, \dots, N_{rep}\} \} \quad (2.121)$$

in die zwei Untermengen

$$S' := \{ \vec{s} \in S : \bar{k}_\nu^{(j)} > k_{sw} \forall j \}, \quad (2.122)$$

$$S'' := S \setminus S'. \quad (2.123)$$

Ebenso spalten wir die Summe über alle $\vec{s} \in S$ aus (2.98) in zwei Teile

$$Q_{\max}(t) = \left(\Sigma' + \Sigma'' \right) / 2, \quad (2.124)$$

$$\Sigma' := \sum_{\vec{s} \in S'} |p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})|, \quad (2.125)$$

$$\Sigma'' := \sum_{\vec{s} \in S''} |p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})|. \quad (2.126)$$

Um Σ' zu evaluieren, merken wir an, dass $\vec{s} \in S'$ mittels (2.122) sofort $\bar{k}_\nu^{(j)} > k_{sw} \forall j$ impliziert und somit unter Verweis auf (2.114) sowie (2.115)

$$\left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right| \leq \bar{k}_{s_j}^{(j)} F / N_{rep}. \quad (2.127)$$

Mit (2.118) und $N_{rep} \geq 1$ folgt, dass $\left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right| \leq \bar{k}_{s_j}^{(j)} / 2$, und mit (2.112), dass

$$k_{s_j}^{(j)}(t) \geq \bar{k}_{s_j}^{(j)} - \left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right| \geq \bar{k}_{s_j}^{(j)} / 2 \forall j. \quad (2.128)$$

Da (2.89) sowie (2.90) positive reelle Zahlen sind, können wir diese Gleichungen logarithmieren und erhalten

$$x := \ln \left[\frac{p_t(\vec{s})}{\bar{p}(\vec{s})} \right] = \sum_{j=1}^{N_{rep}} \ln \left[\frac{k_{s_j}^{(j)}(t)}{\bar{k}_{s_j}^{(j)}} \right], \quad (2.129)$$

$$|p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})| = |\bar{p}(\vec{s}) (e^x - 1)| = \bar{p}(\vec{s}) |e^x - 1|. \quad (2.130)$$

Zuerst betrachten wir den Fall $x \geq 0$. Mit dem Wissen, dass $\ln(1+y) \leq y$ für alle $y > -1$, folgt $\ln(a/b) = \ln(1 + [a-b]/b) \leq [a-b]/b$ und dann mittels (2.129), (2.112) sowie (2.127), dass

$$0 \leq x \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \frac{\left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right|}{\bar{k}_{s_j}^{(j)}} \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \frac{F}{N_{rep}} = F. \quad (2.131)$$

Wann immer $x \geq 0$ in (2.130) gilt somit

$$|e^x - 1| \leq e^F - 1. \quad (2.132)$$

Für den Fall $x < 0$ stellen wir fest, dass

$$|e^x - 1| = e^x (e^{-x} - 1) < e^{-x} - 1, \quad (2.133)$$

$$0 < -x = \sum_{j=1}^{N_{rep}} \ln \left[\frac{\bar{k}_{s_j}^{(j)}}{k_{s_j}^{(j)}(t)} \right], \quad (2.134)$$

wobei wir im letzten Schritt (2.129) benutzt haben. Ähnlich wie in (2.131) erhalten wir daher

$$-x \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \frac{\left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right|}{k_{s_j}^{(j)}(t)} \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \frac{\bar{k}_{s_j}^{(j)}}{k_{s_j}^{(j)}(t)} \frac{F}{N_{rep}}. \quad (2.135)$$

Weil mit (2.128) umgehend $\bar{k}_{s_j}^{(j)}/k_{s_j}^{(j)}(t) \leq 2$ folgt, können wir schließen, dass $-x \leq 2F$, und mit (2.133), dass $|e^x - 1| < e^{2F} - 1$ wann immer $x < 0$ in (2.130). Zusammen mit (2.132) bekommen wir deshalb

$$|e^x - 1| < e^{2F} - 1 \quad (2.136)$$

für beliebige x in (2.130). Aufgrund der Ungleichung $e^z - 1 \leq (e - 1)z \leq 2z$ für alle $z \in [0, 1]$ ergibt sich mit (2.118), dass $e^{2F} - 1 \leq 4F$, und dann mit (2.130) sowie (2.136), dass

$$|p_t(\vec{s}) - \bar{p}(\vec{s})| \leq 4F \bar{p}(\vec{s}). \quad (2.137)$$

Dementsprechend kann Σ' aus (2.125) folgendermaßen abgeschätzt werden

$$\Sigma' \leq 4F \sum_{\vec{s} \in S'} \bar{p}(\vec{s}) \leq 4F \sum_{\vec{s} \in S} \bar{p}(\vec{s}) = 4F. \quad (2.138)$$

Für Σ'' aus (2.126) findet man die obere Schranke

$$\Sigma'' \leq \Sigma_1 + \Sigma_2, \quad (2.139)$$

$$\Sigma_1 := \sum_{\vec{s} \in S''} p_t(\vec{s}), \quad (2.140)$$

$$\Sigma_2 := \sum_{\vec{s} \in S''} \bar{p}(\vec{s}). \quad (2.141)$$

Ferner führen wir die folgenden Teilmengen von S aus (2.121) ein

$$S_j := \left\{ \vec{s} \in S : \bar{k}_{s_j}^{(j)} \leq k_{sw} \right\}, \quad (2.142)$$

wobei $j = 1, \dots, N_{rep}$. Gemäß (2.122) sowie (2.123) existiert für jedes $\vec{s} \in S''$ mindestens ein $j = 1, \dots, N_{rep}$ mit der Eigenschaft $\bar{k}_{s_j}^{(j)} \leq k_{sw}$. Damit reproduziert die Vereinigung aller Teilmengen S_j aus (2.142) die Menge S'' und wir erhalten

$$\Sigma_2 \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \Sigma_2^{(j)}, \quad (2.143)$$

$$\Sigma_2^{(j)} := \sum_{\vec{s} \in S_j} \bar{p}(\vec{s}) = \sum_{\vec{s} \in S_j} \prod_{l=1}^{N_{rep}} \bar{k}_{s_l}^{(l)}. \quad (2.144)$$

Hier haben wir im letzten Schritt (2.90) benutzt. Mit (2.142) ergibt sich

$$\Sigma_2^{(j)} \leq \sum_{\vec{s} \in S_j} k_{sw} \prod_{l \neq j}^{N_{rep}} \bar{k}_{s_l}^{(l)} \leq \sum_{\vec{s} \in S} k_{sw} \prod_{l \neq j}^{N_{rep}} \bar{k}_{s_l}^{(l)}, \quad (2.145)$$

wobei $l \neq j$ indiziert, dass der j -te Faktor ausgelassen wird. Ebenfalls haben wir verwendet, dass $S_j \subset S$ (siehe (2.142)). Mit Blick auf (2.121) schlussfolgern wir, dass

$$\Sigma_2^{(j)} \leq \sum_{s_j=1}^{N_{A_j}} k_{sw} \left(\prod_{l \neq j}^{N_{rep}} \sum_{s_l=1}^{N_{A_l}} \bar{k}_{s_l}^{(l)} \right) = k_{sw} N_{A_j}. \quad (2.146)$$

Im zweiten Schritt des obigen Ausdrucks nutzen wir $\sum_{s_l}^{N_{A_l}} \bar{k}_{s_l}^{(l)} = 1$ für alle l . Unter Berücksichtigung von (2.91) sowie (2.143) finden wir schließlich

$$\Sigma_2 \leq k_{sw} N_{obs} N_{rep}. \quad (2.147)$$

Ähnlich wie in (2.143)-(2.145) erreichen wir mit (2.140) sowie (2.89), dass

$$\Sigma_1 \leq \sum_{j=1}^{N_{rep}} \Sigma_1^{(j)}, \quad (2.148)$$

$$\Sigma_1^{(j)} := \sum_{\vec{s} \in S_j} p_t(\vec{s}) = \sum_{\vec{s} \in S_j} \prod_{l=1}^{N_{rep}} k_{s_l}^{(l)}(t) = \sum_{\vec{s} \in S_j} k_{s_j}^{(j)}(t) \prod_{l \neq j}^{N_{rep}} k_{s_l}^{(l)}(t). \quad (2.149)$$

Für alle s_j , die in der Summe $\vec{s} \in S_j$ auftauchen, impliziert (2.142), dass $\bar{k}_{s_j}^{(j)} \leq k_{sw}$, und mittels (2.116)-(2.118), dass $\epsilon_{s_j}^{(j)} \leq k_{sw}$. Nach Verweis auf (2.112) sowie (2.114) können wir daher ableiten, dass

$$k_{s_j}^{(j)}(t) \leq \bar{k}_{s_j}^{(j)} + \left| \sigma_{s_j}^{(j)}(t) \right| \leq \bar{k}_{s_j}^{(j)} + \epsilon_{s_j}^{(j)} \leq 2k_{sw}. \quad (2.150)$$

Durch Kombination dieses Resultats mit (2.149) ergibt sich analog zu (2.145) sowie (2.146)

$$\Sigma_1^{(j)} \leq 2 \sum_{\vec{s} \in S_j} k_{sw} \prod_{l \neq j}^{N_{rep}} k_{s_l}^{(l)}(t) \leq 2k_{sw} N_{A_j}. \quad (2.151)$$

Wie in (2.147) erhalten wir $\Sigma_1 \leq 2k_{sw} N_{obs} N_{rep}$ und mit (2.139), dass

$$\Sigma'' \leq 3k_{sw} N_{obs} N_{rep}. \quad (2.152)$$

Setzen wir (2.138) und (2.152) in (2.124) ein, impliziert dies

$$Q_{\max}(t) \leq [4F + 3k_{sw} N_{obs} N_{rep}] / 2, \quad (2.153)$$

wobei $k_{sw} > 0$ sowie $F \in (0, 1/2]$ immer noch beliebig gewählt werden können (siehe unterhalb von (2.117)). Darum können wir k_{sw} so wählen, dass die rechte Seite von (2.153) exakt ϵ aus (2.120) gleicht, d.h.

$$k_{sw} = [2\epsilon - 4F] / 3N_{obs} N_{rep}. \quad (2.154)$$

Zusammen implizieren die Gleichungen (2.120), (2.153) sowie (2.154) für hinreichend späte T , dass

$$T_{tot}/T \leq \epsilon, \quad (2.155)$$

$$Q_{\max}(t) \leq \epsilon, \quad (2.156)$$

$$\epsilon = \frac{3\alpha N_{obs}^2 N_{rep}^4}{2F^2 [\epsilon - 2F]}. \quad (2.157)$$

Schließlich treffen wir die Wahl $F = \epsilon/3$, welche durch Minimieren von (2.157) bezüglich F gewonnen wird. Fügen wir jetzt α aus (2.110) sowie $F = \epsilon/3$ in (2.157) ein und lösen dann nach ϵ auf, so erhalten wir (2.101).

Wie unterhalb von (2.114) angekündigt wurde, ist das Resultat (2.156) gültig für alle Zeitpunkte $t \in [0, T]$ abgesehen von der Teilmenge, deren Lebesgue-Maß durch T_{tot} beschränkt ist, sowie unter der Voraussetzung, dass T hinreichend groß ist. Es folgt, dass T^* aus (2.100) nicht größer als T_{tot} werden kann, d.h. $T^* \leq T_{tot}$. Durch den Vergleich mit (2.155) erhalten wir dann (2.99).

Streng genommen sind obige Überlegungen nur selbstkonsistent unter der Bedingung aus (2.118). Daher muss ϵ kleiner als $\frac{3}{2}$ sein. Falls ϵ in (2.101) größer als $\frac{3}{2}$ sein sollte, würden unsere Argumente nicht mehr halten. Dennoch wäre (2.99) trivialerweise erfüllt.

2.3 Equilibration ohne Thermalisierung?

In Vorlesungen sowie Lehrbüchern wird in der Regel nicht zwischen Equilibration und Thermalisierung differenziert. Der Grund dafür findet sich in der phänomenologischen Beobachtung, dass (quantenmechanische) Vielteilchensysteme im Gleichgewicht durch die thermodynamischen Ensembles -mikrokanonisch, kanonisch, großkanonisch- beschrieben werden⁸.

Im Rest dieser Arbeit adaptieren wir die in der statistischen (Quanten-) Mechanik übliche Annahme einer wohldefinierten Systemenergie; d.h. alle Energieniveaus E_n mit nicht vernachlässigbaren Besetzungswahrscheinlichkeiten p_n aus (2.6) liegen in einem Intervall $I_E := [E - \Delta_E, E]$ mit makroskopisch kleiner, aber mikroskopisch großer Breite Δ_E . Dieses Intervall I_E wird oft auch als Energieschale bezeichnet. Die Trunkierung des ursprünglichen Hilbertraums \mathcal{H} um die vernachlässigbar besetzten Energieniveaus entspricht technisch dem Vorgehen aus 2.1.1 und wird daher hier nicht mehr detailliert ausgeführt. Streng genommen müssten wir im Folgenden den reduzierten Hilbertraum sowie die entsprechenden Operatoren analog zu (2.23) kennzeichnen:

$$\tilde{A} := XAX \quad \tilde{H} := XHX \quad \tilde{\rho}(t) := X\rho(t)X, \quad (2.158)$$

wobei X der Projektor auf die Energieschale ist. Da die reduzierten Größen aber alle zentralen Eigenschaften, wie Hermitezität, (2.7) oder $\Delta_{\tilde{A}} \leq \Delta_A$, von den ursprünglichen erben, unterdrücken wir zur besseren Lesbarkeit diese Notation.

⁸Man geht davon aus, dass, zumindest für genügend große Systeme und damit im thermodynamischen Limes, die unterschiedlich motivierten thermodynamischen Ensembles zueinander äquivalente physikalische Vorhersagen machen (siehe z.B. [25]).

Die Definition des mikrokanonischen Ensembles ρ_{mk} auf diesem reduzierten Hilbertraum der Dimension D lautet

$$\rho_{mk} := \frac{1}{D} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (2.159)$$

Zwar haben wir auch in unserer Arbeit zur Equilibration die Annahme schwach besetzter Energieniveaus getätigt (siehe (2.7)), diese war aber weit weniger restriktiv als die mikrokanonische, welche eine exakt gleiche Beteiligung aller Energieeigenzustände in der Energieschale fordert. Im Umkehrschluss ist es höchst nicht trivial, dass die Dichtematrix $\bar{\rho}$, die das Gleichgewicht beschreibt, die selben physikalischen Vorhersagen wie das mikrokanonische Ensemble ρ_{mk} macht. Daher muss ein stationärer Gleichgewichtszustand sich noch lange nicht (wie üblich) thermodynamisch verhalten. Beispiele dafür fehlen aufgrund ihrer Seltenheit im Alltag in vielen Vorlesungen, werden aber in 2.3.2 sowie 3.2 angesprochen. In den vorhergehenden Kapiteln ist uns eine Begründung der Equilibration somit gut gelungen, während die Frage nach der Thermalisierung offen bleibt.

2.3.1 Eigenstate Thermalisation Hypothesis (ETH)

Vor dem Hintergrund der Thermalisierungsproblematik ist die 'eigenstate thermalisation hypothesis' (ETH) als mögliche Lösung zu sehen. Mit etwas anderer Notation als in Kap. 2.1 können wir den Gleichgewichtserwartungswert $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$, gegen welchen nach obigen Erkenntnissen ein quantenmechanisches Vielteilchensystem equilibriert, schreiben als

$$\langle A \rangle_{\bar{\rho}} = \sum_{n=1}^D \langle n | \rho(0) | n \rangle \langle n | A | n \rangle. \quad (2.160)$$

Hierbei bezeichnet $|n\rangle$ die Eigenzustände des Hamiltonoperators H aus (2.1). Falls dieser Entartungen aufweisen sollte, nutzen wir die Freiheit in den entsprechenden Eigenräumen und wählen die Eigenvektoren $|n\rangle$ so, dass $\rho_{mn}(0)$ in jedem Eigenraum diagonal ist. Nun postuliert die ETH in ihrer starken/schwachen Form, dass alle/die meisten Diagonalelemente $\langle n | A | n \rangle$ sehr ähnliche Werte für alle $n \in \{1, \dots, D\}$ annehmen [26]. Unter dieser Annahme wird der Gleichgewichtserwartungswert $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$ sehr gut durch den mikrokanonischen $\langle A \rangle_{\rho_{mk}}$ approximiert⁹. Dementsprechend impliziert eine Equilibration nach Kap. 2.1 kombiniert mit der ETH, dass sich Quanten-Vielteilchensysteme im Gleichgewicht thermisch im Sinne der Statistischen Mechanik verhalten. Die ETH allein ist dagegen nicht hinreichend für die Thermalisierung, da sie nicht die nötige Equilibration garantiert.

Es können natürlich nicht alle Observablen zu einem Hamiltonoperator die ETH erfüllen. Numerische Evidenz lässt vermuten, dass sie für lokale, wenig-Teilchen (engl. few-body) Operatoren in nicht integrierbaren quantenmechanischen Vielteilchensystemen gilt, die keine Vielteilchen-Lokalisierung (engl. many-body

⁹Für die schwache ETH muss bei dieser Schlussfolgerung zusätzlich (2.7) berücksichtigt werden.

localization) aufweisen. Die ungeklärten Begrifflichkeiten werden im Rest dieses sowie in dem Kapitel 2.3.2 erläutert. Kürzlich haben sich auch die analytischen Anzeichen verdichtet, dass die ETH nicht nur hinreichend für das thermische Verhalten des Gleichgewichtserwartungswertes $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$ ist, sondern sogar notwendig [26, 27]. Eine analytische Herleitung dieser Hypothese bleibt dennoch außer Sichtweite.

Es ist zu betonen, dass diese grundlegende Definition der ETH [28] in bestimmten Situationen von manchen Wissenschaftlern um weitere Kriterien ergänzt wird. Dies ist nicht unstrittig und führte beispielsweise jüngst zu Diskussionen, ob es gelungen ist Gegenbeispiele zur ETH zu konstruieren [29, 30, 31]. Ob diese Debatte Einsichten gewährt, die eine analytische Herleitung der ETH erleichtern, ist dem Autor unklar. Daher wird hier nur auf sie hingewiesen, ohne weitere Ausführung.

Lokale few-body Operatoren: In [28] werden lokale Operatoren auf Gittersystemen darüber definiert, auf wie vielen Gitterstellen sie (verschieden von der Einheitsmatrix) operieren. Diese Anzahl wird für lokale Operatoren dann als klein gegenüber der Systemgröße vorausgesetzt. Während hier sofort impliziert ist, dass die Operatoren nur auf wenigen Teilchen (few-body) gleichzeitig basieren, ist das für allgemeinere Modelle nicht der Fall. Für diese bringt man Lokalität oft mit dem langreichweitigem Verhalten der Wechselwirkungspotentiale in Verbindung und stellt zusätzlich fest, dass mittels dieser Wechselwirkungen immer nur wenige Teilchen simultan interagieren. Unabhängig von der spezifischen Definition trägt die obige Einschränkung der realistischen Betrachtung Rechnung, dass wir experimentell nicht den ganzen Hilbertraum mittels beliebiger Operatoren „abtasten“ können. Dieser Prämisse würden auch langreichweitige few-body Operatoren auf Gittersystemen genügen, sowie generell Summen von lokalen few-body Operatoren. Gewissermaßen können in diesem abstrakten Sinn auch unsere realistischen Einschränkungen der Observablen aus den Kapiteln zur Equilibration 2.1 sowie 2.2 als Anforderungen für Lokalität betrachtet werden.

2.3.2 Integrabilität und Many-Body Localization (MBL)

Oft wird eine Verletzung der ETH als Voraussetzung für eine Abweichung vom thermischen Verhalten im Gleichgewicht gesehen. Viel diskutierte Systeme, in denen gewöhnlich die ETH nicht erfüllt ist und Thermalisierung ausbleibt, sind entweder integrabel oder unterliegen der MBL.

Integrable Systeme zeichnen sich durch weitere Erhaltungsgrößen neben dem Hamiltonian H aus, die gleichzeitig lokale few-body Operatoren sind oder Summen davon. In diesem Fall wird der Gleichgewichtszustand durch keines der thermodynamischen Ensembles charakterisiert, sondern muss mittels des allgemeinen Gleichgewichtszustands $\bar{\rho}$ aus (2.8) beschrieben werden. Wir merken an, dass jeder Hamiltonian H immer eine triviale Menge an Erhaltungsgrößen besitzt, nämlich die Projektoren P_n (vgl. (2.1)) auf seine Eigenräume. Diese sind jedoch im Allgemeinen keine lokalen few-body Operatoren. Daher versucht man

den allgemeinen Gleichgewichtszustand $\bar{\rho}$, welcher alle Erhaltungsgrößen respektiert und daher in der Praxis schwer zu bestimmen ist, durch ein generalisiertes Gibbs Ensemble (GGE) ρ_G zu approximieren. Dieses erhält man mit dem in der statistischen Mechanik üblichen Verfahren, die von-Neumann-Entropie zu maximieren und zwar unter der Nebenbedingung, dass die Erwartungswerte der Erhaltungsgrößen unverändert bleiben [32]. Ein weiterer häufig hervorgehobener Unterschied zwischen integralen und nicht integralen Systemen ist die Statistik der Energielücken von benachbarten Energieniveaus E_n [28]. Vom Gesichtspunkt dieser Arbeit aus erscheint dies dem Autor kein hilfreiches Kriterium zur analytischen Ableitung der ETH.

Vielteilchen-lokalisierte Systeme sind sozusagen eine Verallgemeinerung der Anderson-Lokalisierung. Sie weisen (räumlich) lokale, randomisierte Störstellen im Potential auf, was zu einer Abwesenheit oder Unterdrückung von Transportprozessen führt. Im Vergleich mit integralen Systemen weisen MBL-Systeme neben der Abweichung vom thermischem Verhalten viele weitere Ähnlichkeiten auf, beispielsweise bezüglich Erhaltungsgrößen, der Verletzung der ETH oder dem GGE [28], scheinen aber robuster gegenüber Störungen zu sein (sie definieren sich ja gerade über ebensolche).

Es ist darauf hinzuweisen, dass die zuvor vermittelte Anschauung von Integrität sowie MBL keinen allgemeingültigen Definitionen entspricht. Dass präzise Definitionen hierzu fehlen, zeigt sich in der Vielfalt strittiger Möglichkeiten, die in [28] präsentiert werden. Nichtsdestotrotz wird behauptet, dass sowohl integrale als auch MBL-Systeme bereits experimentell realisiert wurden [33, 34, 35].

3 Typische Equilibrationsdynamik

Uns fehlt momentan nicht nur ein gutes Verständnis dafür, warum Vielteilchensysteme im Gleichgewicht so gut durch die thermodynamischen Ensembles beschrieben werden können, sondern vor allem auch dafür, auf welcher Zeitskala sie equilibrieren. Für beide Problematiken werden wir in diesem Kapitel ein besseres Verständnis entwickeln.

3.1 Rückblick: Typikalität in quanten-statistischer Physik

Die Statistische Mechanik ist so faszinierend, da sie unterschiedlichste Vielteilchensysteme im Gleichgewicht beschreibt. Aus diesem Grund, aber auch weil spezielle Systeme im Gegensatz zu Lehrbuchbeispielen analytisch oft nur schwer handhabbar sind, wird versucht die Ableitung der Statistischen Mechanik aus der Quantenmechanik systemunabhängig zu gestalten. Hierbei kommt dann oft das Konzept der Typikalität ins Spiel. Unter Typikalität versteht man die Idee für eine große Menge an Modellsystemen zu zeigen, dass die überwiegende Mehrheit davon sich bezüglich bestimmter Eigenschaften praktisch ununterscheidbar ähnlich verhält. Dann kann man für das reale System eben diese Eigenschaften folgern, sofern es bezüglich der Menge aller Modellsysteme typisch, d.h. nicht ausgezeichnet, ist. Deshalb ist für das Konzept der Typikalität unabdingbar, dass die Grundgesamtheit, über welche all jene Aussagen getroffen werden, physikalisch realistische Eigenschaften hat oder dass potentiell dominierende, unphysikalische Konstituenten zumindest die betrachtete typische Eigenschaft mit dem wahren System teilen. Im Allgemeinen ist das nicht zu beweisen, aber erscheint eben oft sehr wahrscheinlich. Nun möchten wir zwei prominente Verwendungen von Typikalität in der quanten-statistischen Mechanik präsentieren, welche gewissermaßen das Grundgerüst für unsere Resultate in Kap. 3.2 sowie 4 bilden. Dabei wird ersichtlich werden, dass das Prinzip der Typikalität mathematisch eng mit dem Konzept von Zufallsmatrizen verknüpft ist.

Aufbauend auf [36, 37] wurde in [38] gezeigt, dass die Erwartungswerte $\langle \psi | A | \psi \rangle$ einer Observablen A , für die überwiegende Mehrheit aller zufällig aus der Energieschale gezogenen $|\psi\rangle$, praktisch ununterscheidbar von dem mikrokanonischen Erwartungswert $\langle A \rangle_{\rho_{mk}}$ sind. Darum wird das Ergebnis als 'microcanonical typicality' bezeichnet. Es kann also sogar ein einzelner reiner Zustand $|\psi\rangle$ in der Energieschale das mikrokanonische Ensemble ρ_{mk} imitieren.¹⁰ Tatsächlich postuliert die ETH, mit Blick auf Kap. 2.3.1, eben das für (nahezu) jeden Energie-Eigenzustand $|n\rangle$. Da ein derart zufällig gezogener Zustand $|\psi\rangle$ bereits im thermodynamischen Gleichgewicht ist, stellen diese Resultate jedoch keine Erklärung des dynamischen Relaxationsprozesses dar. Nichtsdestotrotz erlauben sie ein stärkeres Fazit als das Prinzip von Jayne's, welches besagt, dass der Zustand maximaler Unkenntnis gerade dem thermischen entspricht. Mittels der Typikalität gilt dies dagegen nicht nur für einen, sondern für nahezu alle Zustände im Hilbertraum.

¹⁰Für equilibrierende Zustände ist eine solche Imitation des gemischten Zustands $\bar{\rho}$ implizit im Kapitel 2.1 enthalten.

Als nächstes diskutieren wir Überlegungen, welche auf von Neumann [6] zurückgehen und kürzlich weiterentwickelt wurden [7, 9, 8, 39]. Erneut reduzieren wir alle Operatoren auf die Energieschale (vgl. Kap. 2.3). Die unitäre Transformation zwischen der Eigenbasis von H und der von A bezeichnen wir mit $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Dann betrachten wir ein ganzes Ensemble an Observablen A , wobei alle das selbe Spektrum an Eigenwerten aufweisen, während die Eigenvektoren so randomisiert werden, dass jede unitäre Transformation U mit der gleichen Wahrscheinlichkeit realisiert wird (Haar-Maß). Hierbei bleibt die Orientierung von $\rho(0)$ zu A aber fest, um nun den gesuchten Nichtgleichgewichtswert zum Startzeitpunkt zu garantieren. Unter den selben schwachen Bedingungen wie für das Equilibrationsresultat aus Kap. 2.1 kann man zeigen, dass die Dynamik von Erwartungswerten (2.3) für die überwiegende Mehrheit aller U thermalisiert; d.h. der Erwartungswert (2.3) ist für praktisch alle hinreichend späten Zeiten t ununterscheidbar von dem mikrokanonischen. Dies ist der Fall für beliebige Anfangszustände $\rho(0)$ innerhalb der Energieschale; spricht für beliebige Zustände mit makroskopisch wohldefinierter Energie. Quantitativ ist das normierte Haar-Maß aller verbleibenden U 's, auf welche die Aussage nicht zutrifft, von der Größenordnung $10^{-\mathcal{O}(f)}$, mit f der Anzahl der Freiheitsgrade (vgl. oberhalb von (2.7)), und dementsprechend unvorstellbar klein. Die entscheidende, physikalisch einleuchtende, aber mathematisch nicht beweisbare Idee von von Neumann besagt, dass das physikalisch realisierte U praktisch nie in diese Ausnahmemenge fallen wird. Anstatt der Eigenbasis von der Observablen A hätte man auch die des Hamiltonians H mittels U randomisieren können, womit die Querverbindung zur Zufallsmatrixtheorie deutlich wird. Von Neumanns Überlegungen erscheinen überzeugend. Warum sollte die Observable A in dem hochdimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} eine „fine getunte“ Orientierung U zum Hamiltonian H aufweisen? Aber Kritik an diesem Vorgehen prangert an, dass die ursprünglichen Erhaltungsgrößen von den durch unterschiedliche U realisierten Dynamiken nicht mehr respektiert werden. Denn Erhaltungsgrößen leben von einer speziellen Orientierung U . Für sie lässt sich eine gemeinsame Eigenbasis mit dem Hamiltonoperator finden. Spätestens wenn Erhaltungsgrößen in der Relaxationsdynamik durch nicht-thermisches Verhalten beobachtbar sind, kann von Neumanns Ansatz nicht mehr korrekt sein.

3.2 Analytische Vorhersage für typische Relaxation

Unter der Prämisse, dass von Neumanns Ansatz (siehe Kap. 3.1), ungeachtet nicht respektierter Symmetrien, wenigstens für einen Teil der thermalisierenden Konfigurationen quantitative Prognosen macht, leitet [40] eine explizite Thermalisierungsdynamik her. Die dort diskutierte Übereinstimmung mit experimentellen und numerischen Beispielen bestätigt die Herangehensweise. Quasi als Nebenprodukt des analytisch geschlossenen Ausdrucks für die Thermalisierungsdynamik fällt die charakteristische Zeitskala $\tau := \hbar/k_B T$ ab, welche auch als Boltzmann-Zeitskala bezeichnet wird. Dieses Resultat ist nicht nur bedeutsam, weil es eine Beschreibung von Vielteilchensystemen fern vom Gleichgewicht erlaubt, sondern auch da die charakteristische Zeitskala als sehr schnell, oft sogar

zu schnell (siehe auch unterhalb (3.8)), bezeichnet werden kann. Insbesondere im Vergleich zu den zuvor bekannten Schranken für die Equilibrationszeit, welche linear mit der Dimension des Hilbertraums skalierten [20] und somit unsere Equilibrationsresultate als unbedeutend in Frage stellten, ist diese Zeitskala ein Fortschritt.

Ziel dieses Kapitels ist die Adaption dieses Resultats, um die Symmetrien des Hamiltonian H zu respektieren, sowie eine Erweiterung auf Situationen, in denen der Gleichgewichtszustand nicht dem thermischen entspricht.

Die auf die Energieschale reduzierte Dynamik von Erwartungswerten lautet mit Blick auf Kap. 2.1.1 sowie 2.3

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} := \sum_{m,n=1}^N A_{mn} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} = \sum_{m,n=1}^N \text{Sp} \{ P_m \rho(0) P_n A \} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}. \quad (3.1)$$

Diese unterscheidet sich von der Dynamik auf dem vollen Hilbertraum (2.3) dadurch, dass sich die Summe auf die N verschiedenen Energieeigenwerte innerhalb der Energieschale der Dimension D beschränkt. Aufgrund möglicher Entartungen gilt $N \leq D$. Mit π bezeichnen wir eine beliebige Permutation von $\{1, \dots, N\}$ und definieren

$$H_\pi := \sum_{n=1}^N E_n P_{\pi(n)} = \sum_{n=1}^N E_{\pi^{-1}(n)} P_n. \quad (3.2)$$

H_π wird also durch Permutieren entweder der Eigenwerte oder der Projektoren auf die Eigenräume des echten Hamiltonoperators H_1 gewonnen.

Im Allgemeinen induziert jedes H_π eine andere Dynamik von $\rho(t)$. Um diese zu erhalten, müssen in (3.1) entweder die Energien oder die Projektoren wie in (3.2) permutiert werden. Dennoch erkennt man schnell, dass folgende wichtige Größen und Eigenschaften unter beliebigen Permutationen π invariant sind:

1. das Energiespektrum und damit die Statistik der Energieniveaus,
2. die Gültigkeit oder Verletzung der ETH,
3. alle Erhaltungsgrößen,
4. der Startwert $\langle A \rangle_{\rho(0)}$,
5. die Approximation des Gleichgewichtszustands $\bar{\rho}$.

Das zentrale Resultat dieses Kapitels betrifft die π und t abhängige Relaxation

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \langle A \rangle_{\bar{\rho}} + F(t) \left\{ \langle A \rangle_{\rho(0)} - \langle A \rangle_{\bar{\rho}} \right\} + \xi_\pi(t), \quad (3.3)$$

$$F(t) := \left(N |\phi(t)|^2 - 1 \right) / (N - 1), \quad (3.4)$$

$$\phi(t) := N^{-1} \sum_{n=1}^N e^{iE_n t/\hbar}. \quad (3.5)$$

Der einzige von π abhängige Term in (3.3) ist $\xi_\pi(t)$ und er erfüllt, für $N \geq 6$, die folgenden Eigenschaften

$$[\xi_\pi(t)]_H = 0, \quad [\xi_\pi^2(t)]_H \leq (6\Delta_A)^2 \max_n p_n, \quad (3.6)$$

wobei H die Menge aller Permutationen von $\{1, \dots, N\}$ bezeichnet und $[\dots]_H$ das Mittel über alle $\pi \in H$. Δ_A sowie $\max_n p_n$ sind die bekannten Größen aus (2.5) sowie (2.7) unseres Equilibrationsresultats mit dem Unterschied, dass wir den Fall eines ausgezeichneten, makroskopisch populierte Energieniveaus auf das nächste Kapitel verschieben, da er nicht nur ein technisch zu berücksichtigendes Detail ist, sondern eine qualitativ unterschiedliche Dynamik vorhersagt. Die Gleichungen (3.3)-(3.6) sind exakte analytische Resultate, sofern $N \geq 6$ und gelten für beliebige, realistische H , A , und ρ . Ihre ausführliche mathematische Herleitung ist mühsam und liefert kaum physikalische Einsichten; daher haben wir sie auf den Anhang 3.2.1 verlagert.

Für generische Quanten-Vielteilchensysteme ist $\max_n p_n$, wie bereits für die Equilibration in (2.7) erörtert, unvorstellbar klein und $N \gg 1$. Damit ist die Anzahl $N!$ der Permutationen $\pi \in H$ gigantisch und $[\xi_\pi^2(t)]_H$ in (3.6) verschwindend gering. In der Konsequenz muss auch $\xi_\pi(t)$ selbst für die überwiegende Mehrheit aller Permutationen $\pi \in H$ sehr klein sein, womit wir dann Gl. (3.3) durch

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \langle A \rangle_{\bar{\rho}} + F(t) \left\{ \langle A \rangle_{\rho(0)} - \langle A \rangle_{\bar{\rho}} \right\} \quad (3.7)$$

approximieren können. Insbesondere trifft diese Approximation auch auf das echte System H_1 zu, es sei denn, es gibt besondere Gründe, warum dessen zeitliche Entwicklung von der praktisch aller anderen H_π abweichen sollte.

Ein starkes Argument warum das echte System H_1 ebenfalls das typische Relaxationsverhalten aufweisen sollte, sind die gemeinsamen physikalischen Eigenschaften 1.-5. aller H_π . Auf der anderen Seite besitzen übliche Hamiltonians H_1 nur kurzreichweitige Wechselwirkungen, modelliert in Form lokaler Operatoren (siehe Kap. 2.3.1). Da die Projektoren auf die Eigenräume des echten, lokalen Hamiltonoperators H_1 im Allgemeinen nicht lokal sind, teilen die meisten H_π die Lokalität von H_1 voraussichtlich nicht;¹¹ beispielsweise

$$H_{\pi=2} = H_1 - E_1 P_1 - E_2 P_2 + E_1 P_2 + E_2 P_1. \quad (3.8)$$

Für einen lokalen Hamiltonoperator H_1 erwartet man einen langsameren Ausgleich von räumlichen Inhomogenitäten der Teilchenzahl, Energie, usw. je weiter die Distanz; dies wäre für die meisten H_π nicht gegeben. Für einen anderen Blickwinkel kann man, anstatt die Projektoren P_n in (3.1) zu permutieren, $\rho(0)$ durch $\rho_\pi(0) := U_\pi^\dagger \rho(0) U_\pi$ ersetzen, mit U_π definiert über $U_\pi P_n = P_{\pi(n)}$ (genauso für A , während H_1 fixiert ist). Selbst wenn $\rho(0) = \rho_1(0)$ nun räumliche Inhomogenitäten aufweist, so erwartet man, dass fast alle anderen $\rho_\pi(0)$ (nahezu) homogen sind. Aus diesem Grund schränken wir unsere Theorie (3.7) auf Anfangszustände ohne signifikante räumliche Inhomogenitäten auf der makroskopischen Skala ein. Alternativ zur Einschränkung der Anfangszustände, mit

¹¹Die Atypikalität von few-body Operatoren bezüglich des Haar-Maßes diskutiert [41].

der streng genommen auch eine Einschränkung der Observablen auf nicht lokale einhergeht, wäre eine Restriktion auf nicht lokale Hamiltonoperatoren. Dies erscheint physikalisch, wie bereits erörtert, problematisch. Natürlich wäre es besser, direkt die Grundgesamtheit, bezüglich der man die Analysen macht, von solchen physikalischen Problemfällen zu befreien, aber das ist technisch höchst anspruchsvoll. Bereits die hier vorgenommene Reduzierung der Menge beliebiger unitärer, Haar-Maß verteilter Transformationen auf die Permutationen der Projektoren P_n auf die Energieeigenräume war nicht klar vorgezeichnet.

Wenden wir uns nun der Funktion $F(t)$ aus Gl. (3.4) sowie (3.5) zu. Man erkennt sofort, dass $F(0) = 1$ und $1 \geq F(t) > -1/N$ für alle Zeiten t . Des Weiteren wurden folgende Eigenschaften bereits in [40] hergeleitet:

- $F(t)$ bleibt vernachlässigbar klein für die überwiegende Mehrheit aller hinreichend späten Zeiten t , sofern $N \gg 1$, was wiederum für realistische Quanten-Vielteilchensysteme, wie bereits diskutiert, generisch ist.
- Wenn wir mit $\Omega(E)$ die Anzahl aller Energien E_n unterhalb des oberen Rands E der Energieschale bezeichnen und mit k_B sowie $S(E) = k_B \ln \Omega(E)$ entsprechend Boltzmanns Konstante sowie Entropie, korrespondiert $T := 1/S'(E)$ mit der dazugehörigen formalen Temperatur. Oft kann man dann die Summe in (3.5) durch eine geeignet geglättete Spektraldichte approximieren, was die Näherung

$$F(t) = 1 / \left[1 + (tk_B T / \hbar)^2 \right] \quad (3.9)$$

erlaubt. Im Falle thermalisierender Systeme können T sowie $S(E)$ mit der üblichen Temperatur sowie Entropie assoziiert werden, aber für Fälle, in denen sich das Gleichgewicht nicht thermisch verhält, besteht keine unmittelbare physikalische Intuition für die Größen.

Abgesehen von Integrabilität sowie MBL gibt es noch einen anderen, simplen Grund warum Gleichgewichtszustände sich nicht thermisch verhalten und zwar wenn der Anfangszustand $\rho(0)$ Energieniveaus E_n außerhalb einer makroskopisch kleinen Energieschale $I_E := [E - \Delta_E, E]$ signifikant populiert. Dies steht der erwähnten, akzeptierten Grundannahme einer wohldefinierten Systemenergie in der Statistischen Mechanik entgegen. Interessanterweise kann sogar diese Situation durch unsere Theorie beschrieben werden, nämlich indem man nur die N Energieniveaus betrachtet, für welche die Besetzungswahrscheinlichkeiten p_n aus (2.6) nicht vernachlässigbar sind. In der Konsequenz bleiben alle Aussagen dieses Kapitels abgesehen von (3.9) weiterhin gültig.

Als erstes Anwendungsbeispiel unserer Theorie schauen wir ein Experiment von Smith et al. [42] mit 10 Ionen in einer linearen Paul-Falle an. Dabei wurde der Ising-Hamiltonian mit Unordnung emuliert:

$$H_1 = \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x + \frac{B}{2} \sum_i \sigma_i^z + \sum_i \frac{D_i}{2} \sigma_i^z \quad (3.10)$$

mit $i, j = 1, \dots, 10$, den Pauli Matrizen $\sigma_i^{x,z}$, den Kopplungen $J_{ij} = J_{\max}/|i-j|^{1.13}$, dem homogenen Feld $B = 4J_{\max}$, den gleichmäßig zufällig verteilten Feldern $D_i \in [-W, W]$ sowie $\hbar = 1$. Für die Wahl des Neelzustands $|\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle$ als Anfangszustand und Unordnung ab der Größenordnung $W = J_{\max}$ findet sich MBL (vgl. Kap. 2.3.2). Die experimentell gemessene Hamming-Distanz $\tilde{D}(t)$ kann hier als Erwartungswert der Observablen $A := (1 - M)/2$ mit $M := \sum_i (-1)^i \sigma_i^z$ (staggered magnetization) ausgedrückt werden [43].

In Abb. 1 vergleichen wir das Experiment mit unserer theoretischen Approximation (3.7), (3.4), indem wir die numerisch bestimmten Eigenwerte E_n des Hamiltonians (3.10) in (3.5)

einsetzen. Des Weiteren mitteln wir, wie im Experiment, die so erhaltenen Dynamiken $\tilde{D}(t)$ über 30 Realisierungen der Unordnung. Für nur 10 Spins ist $\max_n p_n$ im Allgemeinen nicht sehr klein und wächst sogar noch mit W . Daher fokussieren wir uns auf moderate Unordnung $W = 4J_{\max}$ und wir vernachlässigen, wie besprochen, Indizes n , deren Besetzungswahrscheinlichkeiten $p_n < 0.01$. Dies resultiert für die meisten Simulationen in Werten $\max_n p_n \approx 0.1$ und $N \approx 20$. Die entsprechenden Approximationen für $\langle A \rangle_{\rho(0)}$ zeigen besonders starke finite-size Effekte. Darum benutzen wir den a priori bekannten echten Wert $\langle A \rangle_{\rho(0)} = 0$ in (3.7).

Neben den über die Unordnung gemittelten Resultaten erscheinen uns auch individuelle Realisierungen von (3.10) interessant, weil nicht zu erwarten ist, dass die Dynamik sich in allen Realisierungen identisch verhält. Da hierfür keine experimentellen Daten verfügbar waren, haben wir die numerischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung für den Hamiltonian (3.10) aus [42, 43] reproduziert. Die Ergebnisse für zwei Realisierungen sind in Abb. 1 eingefügt. Angesichts der merklichen finite-size Fluktuationen erklärt die Theorie die echte Relaxationsdynamik außerordentlich gut.

Als nächstes schauen wir uns ein kohärent geteiltes Bose-Gas an, wie es experimentell durch Kuhnert et al. [44] realisiert wurde. Die abstrakte Observable ist hier der „mean integrated squared contrast“ $\langle C^2(L, t) \rangle$ des Interferenzmusters der Materiewellen für verschiedene Integrationslängen L . Dieses Experiment realisiert (zumindest approximativ) ein integrables System, welches zuerst gegen ein nicht thermisches Gleichgewicht equilibriert, bevor die schwache Brechung der Integrabilität auf einer längeren Zeitskala ein solches herbeiführt (sog. Präthermalisierung) [45].

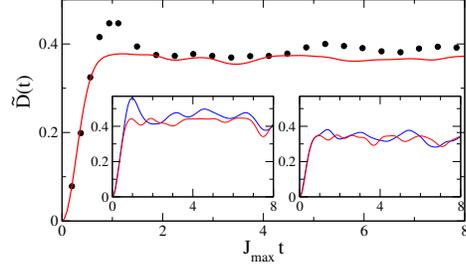


Abbildung 1: (Symbole) Experimentell gemessene Hamming-Distanz $\tilde{D}(t)$ aus Abb. 3(a) in [42] für $W = 4J_{\max}$ gemittelt über 30 Realisierungen der Unordnung in (3.10). (Linie) Korrespondierende Theorie aus (3.7). (Einschübe) Theorie (rote Kurven) und Numerik (blau) für zwei repräsentative Realisierungen der Unordnung.

In Abb. 2 werden die experimentellen Daten mit unserer Theorie (3.7) verglichen. Weil die Modellierung der abstrakten Observable nicht Anspruch dieses Kapitels ist, behandeln wir $\langle A \rangle_{\rho(0)}$ sowie $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$ für jedes gegebene L als Fit-Parameter. Gleichmaßen geht die Abschätzung der effektiven Temperatur T in (3.9) über unsere Intention hinaus, daher haben wir auch sie als Fit-Parameter betrachtet, aber nun natürlich simultan für alle L , was $T = 3nK$ ergibt. Tatsächlich suggeriert Abb. 5 in [46], dass die experimentelle Abschätzung $T_{eff} \approx 10 \pm 3nK$ aus Abb. 3 (bei $t_l = 0ms$) in [45] auch in unserer jetzigen Situation eine vernünftige Näherung sein könnte. Hierbei ist T_{eff} eine weitere effektive Temperatur, welche mit T im thermischen Gleichgewicht übereinstimmen würde, in dieser Situation aber durchaus verschieden von T sein kann.¹² Zudem basiert die experimentelle Abschätzung für T_{eff} auf einer komplexen Prozedur [45], deren implizite Voraussetzungen nur ungefähr erfüllt sein könnten. Daher erscheint $T = 3nK$ mit den experimentellen Beobachtungen im Einklang, vor allem da die entsprechende theoretische Kurve die Daten in Abb. 2 gut erklärt.

Das dritte Beispiel widmet sich einem numerischen Ergebnis Rigols für ein integrables Modell [47], bestehend aus acht „hardcore“ Bosonen auf einem eindimensionalen, periodischen Gitter mit 24 Plätzen. Die detaillierte Definition der Observable $\delta n_k(t)$ wird hier nicht wiederholt, weil nur die Anfangs- sowie Gleichgewichtswerte in (3.7) gebraucht werden. Beide sind ohnehin nicht theoretisch abzuschätzen und werden darum als Fit-Parameter behandelt. Des Weiteren benutzen wir die Näherung (3.9) mit der Abschätzung $T = 2$ aus [47] (in Einheiten mit $k_B = \hbar = 1$). Die resultierende Übereinstimmung mit den numerischen Daten in Abb. 3 ist erstaunlich gut in Anbetracht dessen, dass das System nur aus acht Bosonen besteht.

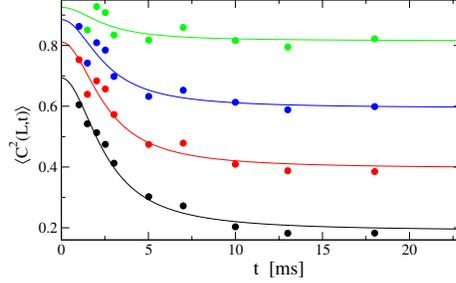


Abbildung 2: (Symbole) „Experimental mean integrated squared contrast“ aus Abb. 3 in [44] für Integrationslängen $L = 18, 40, 60$, und $100 \mu m$, von oben nach unten sowie um jeweils $0.3, 0.2, 0.1$ und 0.0 vertikal zur besseren Sichtbarkeit verschoben. (Linien) Theoretische Approx. (3.7), (3.9) mit $T = 3nK$.

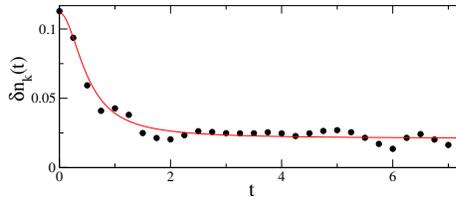


Abbildung 3: (Symbole) Numerische Resultate aus Abb. 1(e) in [47]. (Linie) Theoretische Approximation (3.7), (3.9) mit weiteren Details im Haupttext.

¹²Nichtsdestotrotz erscheint es nicht abwegig, dass T sowie T_{eff} einer Temperatur des GGE (vgl. 2.3.2) entsprechen.

Unser letztes Beispiel ist das integrable XXZ-Modell von Torres-Herrera et al. aus [48]. Der Anfangswert $\langle A \rangle_{\rho(0)} = 0.25$ in (3.7) ist a priori für den Spin-Spin Korrelator $A := C^z(t)$ bekannt, während $\langle A \rangle_{\bar{\rho}}$ als Fit-Parameter betrachtet wird. $F(t)$ wird hier mittels (3.4) und der Näherung der diskreten Energieniveaus durch eine kontinuierliche Spektraldichte ausgewertet [40]. Mit Blick auf Tabelle 1 sowie Abb. 3(b) in [48] approximieren wir diese Dichte als konstant innerhalb eines Energieintervalls $I_E = [-1.8, 1.8]$ und als verschwindend außerhalb dessen. Die resultierende Übereinstimmung mit der Numerik in Abb. 4 spricht für sich.

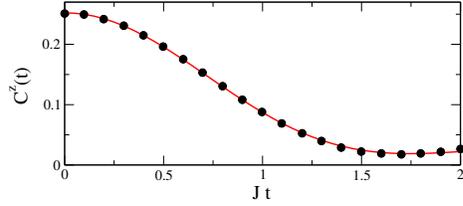


Abbildung 4: (Symbole) Numerische Resultate für den Spin-Spin Korrelator $C^z(t)$ aus Abb. 8 in [48] für ein Spin-1/2 XXZ Modell mit 16 Spins, Kopplung J , Anisotropie $\Delta = 1/2$, $\hbar = 1$ sowie einem Anfangszustand aus Paaren paralleler Spins. (Linie) Theoretische Vorhersage (3.7), wie im Text spezifiziert.

Zusammenfassend haben wir in diesem Kapitel eine allgemeine analytische Theorie für die Equilibrationsdynamik von isolierten quantenmechanischen Vielteilchensystemen entworfen, unabhängig davon, ob diese thermalisieren oder nicht. Die zentralen Voraussetzungen sind Anfangszustände $\rho(0)$, welche kein Energieniveau E_n zu stark populieren und keine signifikanten räumlichen Inhomogenitäten auf makroskopischer Ebene aufweisen. Während die erste Annahme bereits den Equilibrationsresultaten aus Kap. 2 zu Grunde lag und dementsprechend schwach ist, bildet die zweite eine echte Einschränkung. Es ist uns zwar gelungen alle Erhaltungsgrößen des echten Systems im Rahmen unseres Typikalitätsansatzes zu respektieren, ein enormer Fortschritt, aber für die Lokaliitätsstruktur bleibt dies eine Zukunftsaufgabe. Mögliche Ansätze sind eine Ableitung der Relaxationsdynamik mit dem Typikalitätsansatz von Deutsch [49] oder heuristische Argumente in [50]. Bemerkenswerterweise ist die Entartung der Energielücken g aus (2.11) in Kap. 2 für die typische Equilibrationsdynamik nicht notwendig. In diesem Kapitel 3.2 sowie in Anhang 3.2.1 haben wir gegenüber der Publikation [11], auf welcher dieses Kapitel beruht, auch eine mögliche Entartung des Hamiltonians zugelassen. Die Relaxationsdynamik im Falle eines stark besetzten Energieniveaus wird in Kap. 3.3 besprochen.

3.2.1 Anhang 3.A

Mittelwerte über Permutationen: Wie im übergeordneten Kapitel bezeichnen wir mit Π die Menge aller Permutationen von $\{1, \dots, N\}$ für ein beliebiges, aber festes $N \in \mathbb{N}$. Daher existieren $N!$ Elemente $\pi \in \Pi$.

Als nächstes betrachten wir ein beliebiges, aber festes $n \in \{1, \dots, N\}$ und definieren

$$\Pi_\nu := \{\pi \in \Pi \mid \pi(n) = \nu\} \quad (3.11)$$

für jedes $\nu \in \{1, \dots, N\}$. Folglich gehört jedes $\pi \in \Pi$ nur zu genau einer dieser

Untermengen $\Pi_\nu \subset \Pi$. Aus Symmetriegründen enthält jede dieser N Untermengen Π_ν die gleiche Anzahl an Elementen, welche somit $(N-1)!$ entsprechen muss.

Mit der Bezeichnung $[\dots]_{\Pi}$ für das Mittel über alle $\pi \in \Pi$ können wir für jede Funktion $f : \{1, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{C}$ sowie beliebiges, aber festes $n \in \{1, \dots, N\}$ schließen, dass

$$[f(\pi(n))]_{\Pi} := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \Pi} f(\pi(n)) = \frac{1}{N!} \sum_{\nu=1}^N \sum_{\pi \in \Pi_\nu} f(\pi(n)), \quad (3.12)$$

wobei die zweite Identität die obige Beobachtung, dass Π die disjunkte Vereinigung aller Π_ν ist, benutzt. Des Weiteren folgern wir mit $\pi(n) = \nu$ für alle $\pi \in \Pi_\nu$ (vgl. (3.11)), dass

$$[f(\pi(n))]_{\Pi} = \frac{1}{N!} \sum_{\nu=1}^N (N-1)! f(\nu) = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^N f(\nu) \quad (3.13)$$

unabhängig von n .

Analog dazu betrachten wir ein beliebiges, aber festes Paar $m, n \in \{1, \dots, N\}$ mit $m \neq n$ und definieren

$$\Pi_{\mu\nu} := \{\pi \in \Pi \mid \pi(m) = \mu, \pi(n) = \nu\}. \quad (3.14)$$

Genau wie zuvor folgt, dass jedes $\pi \in \Pi$ nur in exakt einem $\Pi_{\mu\nu}$ enthalten sein kann und dass jedes $\Pi_{\mu\nu}$ exakt $(N-2)!$ Elemente besitzt. Für beliebige komplexwertige Funktionen mit zwei verschiedenen Argumenten $m, n \in \{1, \dots, N\}$ erhalten wir dann

$$[f(\pi(m), \pi(n))]_{\Pi} := \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in \Pi} f(\pi(m), \pi(n)) = \frac{1}{N!} \sum'_{\mu\nu} \sum_{\pi \in \Pi_{\mu\nu}} f(\pi(m), \pi(n)). \quad (3.15)$$

Hier und auch im Rest dieses Anhangs bedeutet \sum' , dass alle Summationsindizes von 1 bis N laufen und paarweise verschieden sind. Jetzt können wir wiederum ableiten, dass

$$[f(\pi(m), \pi(n))]_{\Pi} = \frac{1}{N!} \sum'_{\mu\nu} (N-2)! f(\mu, \nu) = \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\mu\nu} f(\mu, \nu) \quad (3.16)$$

für alle $m \neq n$. Die direkte Verallgemeinerung der vorhergehende Formel lautet dann

$$[f(\pi(n_1), \dots, \pi(n_K))]_{\Pi} = \frac{(N-K)!}{N!} \sum'_{\nu_1 \dots \nu_K} f(\nu_1, \dots, \nu_K) \quad (3.17)$$

für jedes K -Tupel (n_1, \dots, n_K) von paarweise verschiedenen ganzen Zahlen $n_k \in \{1, \dots, N\}$ und jede komplexwertige Funktion $f(n_1, \dots, n_K)$.

Untermengen von Quadrupeln: Für jedes gegebene $N \in \mathbb{N}$ definieren wir die Menge der Quadrupel

$$I := \{ (k, l, m, n) \mid k, l, m, n \in \{1, \dots, N\} \} . \quad (3.18)$$

Als nächstes führen wir 15 Untermengen I_a , $a = 1, \dots, 15$, von I ein, welche durch die nachfolgenden Eigenschaften ihrer Elemente (k, l, m, n) definiert sind:

$$\begin{array}{ll} I_1 : k = l = m = n & I_6 : m = n \text{ und } k, l, m \text{ paarweise verschieden} \\ I_2 : l = m = n, k \neq l & I_7 : k = l \text{ und } k, m, n \text{ paarweise verschieden} \\ I_3 : k = m = n, l \neq k & I_{11} : k = m \text{ und } k, l, n \text{ paarweise verschieden} \\ I_4 : k = l = n, m \neq n & I_{12} : l = n \text{ und } k, l, m \text{ paarweise verschieden} \\ I_5 : k = l = m, n \neq m & I_{13} : l = m \text{ und } k, l, n \text{ paarweise verschieden} \\ I_8 : k = l, m = n, k \neq m & I_{14} : k = n \text{ und } k, l, m \text{ paarweise verschieden} \\ I_9 : k = m, l = n, k \neq l & I_{15} : k, l, m, n \text{ paarweise verschieden} \\ I_{10} : k = n, l = m, k \neq l & \end{array} \quad (3.19)$$

Die Reihenfolge der Indizes von I_6, \dots, I_{10} mag merkwürdig erscheinen, wird sich später aber als praktisch herausstellen. Es ist einleuchtend, dass jedes Quadrupel $(k, l, m, n) \in I$ nur in einer der 15 Untermengen I_a enthalten ist. Daher entspricht I der disjunkten Vereinigung aller 15 Untermengen I_a .

Schließlich betrachten wir die Menge der Quadrupel

$$J := \{ (k, l, m, n) \in I \mid k \neq l, m \neq n \} . \quad (3.20)$$

Weil $J \subset I$ und I die disjunkte Vereinigung aller 15 Untermengen I_a ist, folgt, dass J der disjunkten Vereinigung aller 15 Untermengen $J_a := J \cap I_a$ entspricht. Die Definitionen (3.19) sowie (3.20) implizieren sofort, dass die Untermengen J_1, \dots, J_8 leer sind und $J_a = I_a$ für $a = 9, \dots, 15$. Darum ist J nichts Anderes als die disjunkte Vereinigung der Untermengen I_a mit $a = 9, \dots, 15$.

Herleitung des zentralen Resultats: Wie im übergeordneten Kapitel betrachten wir einen beliebigen, aber festen Hamiltonoperator $H_1 = \sum_{n=1}^N E_n |n\rangle\langle n|$. Zudem erinnern wir uns an die Definition (3.2), nämlich

$$H_\pi := \sum_{n=1}^N E_n |\pi(n)\rangle\langle \pi(n)| . \quad (3.21)$$

Vergleichbar mit (3.1) lautet die durch H_π induzierte Dynamik des Zustands $\rho(t) = \mathcal{U}_t \rho(0) \mathcal{U}_t^\dagger$ mit $\mathcal{U}_t := \exp(-iH_\pi t/\hbar)$, während die des Erwartungswertes $\langle A \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp} \{ \rho(t) A \}$ die Form

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \sum_{m,n=1}^N g(\pi(m), \pi(n)) e_m^n \quad (3.22)$$

$$g(m, n) := A_{mn} = \text{Sp} \{ P_m \rho(0) P_n A \} \quad (3.23)$$

$$e_m^n := \exp(i [E_n - E_m] t / \hbar) \quad (3.24)$$

annimmt. Hier haben wir zur besseren Lesbarkeit die Zeitabhängigkeit in der Notation unterdrückt.

Das erste Ziel der nachfolgenden Berechnungen ist die Evaluation des Mittels $[\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi}$. Unter der Bezeichnung der Abweichung vom Mittelwert durch

$$\xi_{\pi}(t) := \langle A \rangle_{\rho(t)} - [\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi} , \quad (3.25)$$

ist unser zweites Ziel Gleichungen (3.3) sowie (3.6) zu verifizieren. Schon jetzt können wir anmerken, dass die erste Beziehung in (3.6) umgehend aus der Definition von $\xi_{\pi}(t)$ folgt.

Bevor wir mit diesen Berechnungen beginnen, wollen wir einige nützliche Definitionen und Relationen einführen. Wie zuvor ist das Diagonalsemble $\bar{\rho}$ durch

$$\bar{\rho} := \sum_{n,m} \delta_{nm} P_n \rho(0) P_m \quad (3.26)$$

definiert. δ_{nm} ist das Kronecker-Delta. Wir erinnern uns (vgl. Kap. 2), dass $\bar{\rho}$ hermitesch und nicht negativ ist, sowie die Spur von $\bar{\rho}$ auf Eins normiert ist; d.h. $\bar{\rho}$ ergibt auch eine wohl definierte Dichtematrix. Des Weiteren definieren wir die hermiteschen Hilfsoperatoren B und C durch

$$B := \sum_{n,m} \delta_{nm} P_n A P_m , \quad C := A - B . \quad (3.27)$$

Auch jetzt bezeichnet $\|A\|$ wieder die Norm des Operators A , sprich den Betrag des größten Eigenwertes. Damit schließen wir sofort, dass

$$\|B\| \leq \|A\| , \quad \|C\| \leq 2 \|A\| . \quad (3.28)$$

Schon für die Equilibrationsresultate in Kap. 2 haben wir uns zu Nutze gemacht, dass Ausdrücke wie $\xi_{\pi}(t)$ aus (3.25) invariant bleiben, wenn eine beliebige Konstante zu A addiert wird. Hier gebrauchen wir das für die Vereinfachung

$$\|A\| = \Delta_A / 2 \quad (3.29)$$

sofern Eigenschaften von $\xi_{\pi}(t)$ betroffen sind.

Schließlich rekapitulieren wir die Definitionen (3.4) sowie (3.5) aus dem übergeordneten Kapitel:

$$F(t) := \left(N |\phi(t)|^2 - 1 \right) / (N - 1) , \quad (3.30)$$

$$\phi(t) := N^{-1} \sum_{n=1}^N e^{i E_n t / \hbar} . \quad (3.31)$$

Unter Ausnutzung von (3.24) erhält man umgehend

$$F(t) = \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{nm} e_m^n. \quad (3.32)$$

AUSWERTUNG DES ERWARTUNGSWERTES: Mit Bezug auf (3.22) finden wir

$$[\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi} = \sum_{m,n=1}^N [g(\pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_m^n = Q + R \quad (3.33)$$

$$Q := \sum_{n=1}^N [g(\pi(n), \pi(n))]_{\Pi} \quad (3.34)$$

$$R := \sum'_{mn} [g(\pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_m^n. \quad (3.35)$$

Dabei haben wir gemäß (3.24) ausgenutzt, dass $e_n^n = 1$. Wir wählen $f(n) := g(n, n)$ in (3.13) und erhalten

$$Q = \sum_{\nu=1}^N g(\nu, \nu). \quad (3.36)$$

Ebenso wählen wir $f(m, n) := g(m, n)$ in (3.16), womit

$$R = \sum'_{mn} e_m^n \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\mu\nu} g(\mu, \nu). \quad (3.37)$$

Zusammen mit (3.32) sowie (3.36) können wir die letzte Gleichung zu

$$R = F(t) \left[\sum_{\mu, \nu=1}^N g(\mu, \nu) - Q \right] \quad (3.38)$$

umschreiben. Die Definition (3.23) impliziert nun, dass

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N g(\mu, \nu) = \sum_{\mu, \nu=1}^N \text{Sp} \{ P_{\mu} \rho(0) P_{\nu} A \} = \text{Sp} \{ \rho(0) A \}. \quad (3.39)$$

Gleichermaßen ergibt sich, dass

$$\sum_{\nu=1}^N g(\nu, \nu) = \text{Sp} \{ \bar{\rho} A \}. \quad (3.40)$$

Setzen wir jetzt (3.39) sowie (3.40) in (3.36) sowie (3.38) ein, so finden wir mit der üblichen Notation $\langle A \rangle_{\rho} = \text{Sp} \{ \rho A \}$, dass

$$[\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi} = \langle A \rangle_{\bar{\rho}} + F(t) \left\{ \langle A \rangle_{\rho(0)} - \langle A \rangle_{\bar{\rho}} \right\}. \quad (3.41)$$

Daraus folgt mittels (3.25) umgehend (3.3).

Für später nutzen wir nun bereits (3.26) sowie (3.27), um

$$\text{Sp} \{\bar{\rho}A\} = \sum_{n=1}^N \text{Sp} \{P_n \bar{\rho} P_n A\} = \text{Sp} \{\rho(0) B\} \quad (3.42)$$

und damit

$$\text{Sp} \{\rho(0) A\} - \text{Sp} \{\bar{\rho}A\} = \text{Sp} \{\rho(0) (A - B)\} = \text{Sp} \{\rho(0) C\} \quad (3.43)$$

umzuschreiben. Des Weiteren reformulieren wir (3.38) mit (3.32) zu

$$R = \text{Sp} \{\rho(0) C\} \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{nm} e_m^n. \quad (3.44)$$

AUSWERTUNG DER VARIANZ: Aus (3.22)-(3.24) schließen wir, dass

$$(\langle A \rangle_{\rho(t)})^2 = \sum_{klmn \in I} h(\pi(k), \pi(l), \pi(m), \pi(n)) e_{km}^{ln}, \quad (3.45)$$

wobei

$$h(k, l, m, n) := g(k, l)g(m, n) \quad (3.46)$$

$$e_{km}^{ln} := e_k^l e_m^n. \quad (3.47)$$

Die Summe $\sum_{klmn \in I}$ läuft über alle Quadrupel von Indizes, die in I aus (3.18) enthalten sind. Wie unterhalb von (3.19) ausgeführt, entspricht die Menge I der disjunkten Vereinigung aller 15 Untermengen I_a . Darum können wir aus (3.45) folgern, dass

$$[(\langle A \rangle_{\rho(t)})^2]_{\Pi} = \sum_{a=1}^{15} S_a \quad (3.48)$$

$$S_a := \sum_{klmn \in I_a} [h(\pi(k), \pi(l), \pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_{km}^{ln}. \quad (3.49)$$

Als nächstes wollen wir die 15 Terme S_a in (3.49) auswerten. Schnell erkennt man, dass I_2 in (3.19) zu I_4 wird, wenn man die Indizes k und m sowie gleichzeitig die Indizes l und n vertauscht. Ebenso wird auch I_3 zu I_5 und I_6 zu I_7 . Dabei bleiben in diesen Fällen (3.46) sowie (3.47) und daher auch die Summanden in (3.49) invariant unter dieser Vertauschung. Folglich gilt

$$S_4 = S_2, \quad S_5 = S_3, \quad S_7 = S_6. \quad (3.50)$$

Auf der einen Seite geht unter der Vertauschung von k und l sowie m und n die Untermenge I_{11} in I_{12} und die Untermenge I_{13} in I_{14} über. Auf der anderen Seite beobachten wir mit Blick auf (3.23) sowie (3.24), dass die Terme (3.46) sowie (3.47) und somit die Summanden in (3.49) unter dieser Vertauschung der Indizes dem komplex konjugierten ihrer selbst entsprechen. Deshalb gilt

$$S_{12} = S_{11}^*, \quad S_{14} = S_{13}^*. \quad (3.51)$$

BERECHNUNG VON S_1, \dots, S_8 : Für $a = 1$ sind alle vier Indizes in (3.19) gleich. Mit (3.24) folgt dann, dass der Ausdruck (3.47) Eins ist, während (3.49) zu

$$S_1 = \sum_{n=1}^N [h(\pi(n), \pi(n), \pi(n), \pi(n))]_{\Pi} \quad (3.52)$$

wird. Wählen wir nun $f(n) := h(n, n, n, n)$ in (3.13), bekommen wir

$$S_1 = \sum_{\nu=1}^N h(\nu, \nu, \nu, \nu) . \quad (3.53)$$

Entlang der gleichen Argumentationskette finden wir für $a = 8$ durch die Wahl $f(m, n) := h(m, m, n, n)$ in (3.16), dass

$$S_8 = \sum'_{ln} [h(\pi(l), \pi(l), \pi(n), \pi(n))]_{\Pi} = \sum'_{\lambda\nu} h(\lambda, \lambda, \nu, \nu) . \quad (3.54)$$

Die Kombination von (3.53) sowie (3.54) liefert

$$S_1 + S_8 = \sum_{\lambda\nu=1}^N h(\lambda, \lambda, \nu, \nu) . \quad (3.55)$$

Mit (3.46) sowie (3.36) können wir (3.55) umformulieren zu

$$S_1 + S_8 = Q^2 . \quad (3.56)$$

Verwandte Überlegungen führen für $a = 6$ zu

$$S_6 = \sum'_{kln} [h(\pi(k), \pi(l), \pi(n), \pi(n))]_{\Pi} e_{kn}^{ln} \quad (3.57)$$

$$= \sum'_{kln} e_{kn}^{ln} \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \sum'_{\kappa\lambda\nu} h(\kappa, \lambda, \nu, \nu) . \quad (3.58)$$

Hierbei haben wir in der letzten Umformung (3.17) mit $K = 3$ sowie $f(k, l, n) := g(k, l, n, n)$ benutzt. Aufgrund von (3.47) sowie (3.24) gilt $e_{kn}^{ln} = e_k^l$, womit die Summanden in (3.58) unabhängig von n sind. Da die Indizes gestrichener Summen alle paarweise verschieden sein müssen, folgt in diesem Fall für jedes Paar (k, l) , dass der Index n genau $N - 2$ verschiedene Werte annehmen kann. Daher liefert die Summation über n eben diesen Faktor $N - 2$ und wir erhalten

$$S_6 = \sum'_{kl} e_k^l \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\kappa\lambda\nu} h(\kappa, \lambda, \nu, \nu) . \quad (3.59)$$

Die Berechnung von S_2 sowie S_3 gestaltet sich ganz ähnlich zu der von S_6 (sogar etwas leichter) und liefert

$$S_2 = \sum'_{kl} e_k^l \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\kappa\lambda} h(\kappa, \lambda, \lambda, \lambda) \quad (3.60)$$

$$S_3 = \sum'_{kl} e_k^l \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\kappa\lambda} h(\kappa, \lambda, \kappa, \kappa). \quad (3.61)$$

Zusammengenommen ergeben (3.59)-(3.61) dann

$$S_2 + S_3 + S_6 = \sum'_{kl} e_k^l \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\kappa\lambda} \sum_{\nu=1}^D h(\kappa, \lambda, \nu, \nu). \quad (3.62)$$

Betrachten wir (3.46) und nutzen (3.36) sowie (3.37) können wir schließen, dass

$$S_2 + S_3 + S_6 = Q R, \quad (3.63)$$

und mit (3.50) sowie (3.56), dass

$$\sum_{a=1}^8 S_a = Q^2 + 2 Q R. \quad (3.64)$$

OBERE SCHRANKEN FÜR S_9, \dots, S_{14} : Unter Verweis auf I_9 in (3.19) können wir S_9 aus (3.49) ausdrücken als

$$\begin{aligned} S_9 &= \sum'_{mn} [h(\pi(m), \pi(n), \pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_{mm}^{nn} \\ &= \sum'_{mn} e_{mm}^{nn} \frac{1}{D(D-1)} \sum'_{\mu\nu} h(\mu, \nu, \mu, \nu), \end{aligned} \quad (3.65)$$

wobei wir (3.17) mit $f(m, n) := g(m, n, m, n)$ im letzten Schritt angewandt haben. Mit Blick auf (3.47) sowie (3.24) folgt $|e_{mm}^{nn}| = 1$. Da die gestrichene Summe über m und n aus $N(N-1)$ Summanden besteht, folgern wir

$$|S_9| \leq \sum'_{mn} |e_{mm}^{nn}| \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\mu\nu} |h(\mu, \nu, \mu, \nu)| = \sum'_{\mu\nu} |\text{Sp} \{P_{\mu} \rho P_{\nu} A\}|^2. \quad (3.66)$$

Für die zweite Umformung haben wir von (3.46) sowie (3.23) Gebrauch gemacht. Des Weiteren nutzen wir im Folgenden die abkürzende Notation $\rho := \rho(0)$. Der Term, den wir jetzt erhalten haben, tauchte bereits in (2.64) im Anhang der Equilibrationsresultate auf und wurde dort abgeschätzt. Die Berechnung war an jener Stelle sogar allgemeiner, weil ein makroskopisch besetzter Zustand erlaubt war. Aus diesem Grund wiederholen wir die Überlegungen an dieser Stelle nicht; für den Fall ohne makroskopischen besetztes Niveau finden sie sich in vereinfachter Darstellung in [18] und besagen, dass

$$|S_9| \leq \sum'_{\mu\nu} |\text{Sp} \{P_{\mu} \rho P_{\nu} A\}|^2 \leq 1/4 \max_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.67)$$

An dieser Stelle kann man sich fragen, ob die typische Equilibrationsdynamik aus (3.7) auch für Systeme mit makroskopisch besetztem Vielteilchen-Zustand

gilt. Aus zwei Gründen ist dies nicht zu erwarten: Erstens lassen sich die Abschätzungen an späterer Stelle in diesem Kapitel nicht so leicht auf den Fall verallgemeinern wie an dieser. Und selbst wenn dies möglich wäre, würde man zweitens wie im übergeordneten Kapitel argumentieren, dass dieser Zustand ausgezeichnet ist und eine gleichwertige Permutation mit den anderen zu einer unphysikalischen Grundgesamtheit führt. Daher nehmen wir ihn in Kapitel 3.3 von der Permutation aus und finden in der Tat eine andere Relaxationsdynamik (3.120) als in (3.7).

Ebenso finden wir für $a = 10$, dass

$$\begin{aligned} S_{10} &= \sum'_{mn} [h(\pi(n), \pi(m), \pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_{nm}^{mn} \\ &= \sum'_{mn} e_{nm}^{mn} \frac{1}{N(N-1)} \sum'_{\mu\nu} h(\mu, \nu, \nu, \mu) . \end{aligned} \quad (3.68)$$

Für die Einsicht, dass $e_{nm}^{mn} = 1$, verweisen wir erneut auf (3.47) sowie (3.24). Wie bekannt besteht die gestrichene Summe über m und n aus $N(N-1)$ Summanden. Zudem benutzen wir wiederum (3.46) sowie (3.23) und bekommen

$$S_{10} = \sum'_{\mu\nu} \text{Sp} \{P_{\mu\rho} P_{\nu} A\} \text{Sp} \{P_{\nu\rho} P_{\mu} A\} = \sum'_{\mu\nu} |\text{Sp} \{P_{\mu\rho} P_{\nu} A\}|^2 . \quad (3.69)$$

Damit entspricht diese Summe der in (3.67) und es gilt die selbe Abschätzung

$$|S_{10}| \leq 1/4 \max_n p_n \Delta_A^2 . \quad (3.70)$$

Im Fall $a = 11$ ergibt sich, dass

$$\begin{aligned} S_{11} &= \sum'_{kln} [h(\pi(k), \pi(l), \pi(k), \pi(n))]_{\Pi} e_{kk}^{ln} \\ &= \sum'_{kln} e_{kk}^{ln} \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \sum'_{\kappa\lambda\nu} h(\kappa, \lambda, \kappa, \nu) . \end{aligned} \quad (3.71)$$

Da $|e_{kk}^{ln}| = 1$ und die gestrichene Summe über k, l, n aus $N(N-1)(N-2)$ Summanden besteht, erhalten wir

$$|S_{11}| \leq \left| \sum'_{\kappa\lambda\nu} h(\kappa, \lambda, \kappa, \nu) \right| = \left| \sum'_{\kappa\lambda\nu} \text{Sp} \{P_{\kappa\rho} P_{\lambda} A\} \text{Sp} \{P_{\kappa\rho} P_{\nu} A\} \right| . \quad (3.72)$$

Für den letzten Schritt verweisen wir wieder auf (3.46) sowie (3.23). Die gestrichene Summe läuft über alle κ, λ, ν mit der Einschränkung, dass die Indizes paarweise verschieden sein müssen. Sie lässt sich deshalb als Summe über alle κ, λ, ν schreiben, wenn wir jeden Summanden mit dem zusätzlichen Faktor $(1 - \delta_{\lambda\kappa})(1 - \delta_{\nu\kappa})(1 - \delta_{\nu\lambda})$ multiplizieren. Unter der Beobachtung, dass $(1 - \delta_{\lambda\kappa})P_{\lambda} A P_{\kappa} = P_{\lambda} C P_{\kappa}$ sowie $(1 - \delta_{\nu\kappa})P_{\nu} A P_{\kappa} = P_{\nu} C P_{\kappa}$ (siehe (3.27)), finden

wir

$$|S_{11}| \leq \left| \sum_{\kappa, \lambda, \nu=1}^N (1 - \delta_{\nu\lambda}) \text{Sp} \{ \rho P_\lambda C P_\kappa \} \text{Sp} \{ \rho P_\nu C P_\kappa \} \right| \leq V + W \quad (3.73)$$

$$V := \left| \sum_{\kappa, \lambda, \nu=1}^N \text{Sp} \{ \rho P_\lambda C P_\kappa \} \text{Sp} \{ \rho P_\nu C P_\kappa \} \right| \leq \sum_{\kappa=1}^N |\text{Sp} \{ P_\kappa \rho C P_\kappa \}|^2 \quad (3.74)$$

$$W := \left| \sum_{\kappa, \lambda=1}^N \text{Sp} \{ \rho P_\lambda C P_\kappa \} \text{Sp} \{ \rho P_\lambda C P_\kappa \} \right| \leq \sum_{\kappa, \lambda=1}^N |\text{Sp} \{ \rho P_\lambda C P_\kappa \}|^2. \quad (3.75)$$

Zur Abschätzung von V nutzen wir, wie bereits in (2.31), die Cauchy-Schwarz Ungleichung für das Skalarprodukt von Operatoren:

$$V \leq \sum_{\kappa=1}^N \text{Sp} \{ P_\kappa \rho P_\kappa \} \text{Sp} \{ P_\kappa C \rho C P_\kappa \} \leq \max_n p_n \sum_{\kappa=1}^N \text{Sp} \{ P_\kappa C \rho C \}. \quad (3.76)$$

$$V \leq \max_n p_n \text{Sp} \{ \rho C^2 \} \leq \max_n p_n \|C^2\| \text{Sp} \{ \rho \} = 4 \max_n p_n \|A\|^2, \quad (3.77)$$

wobei wir für die erste Umformung in (3.77) ausnutzen, dass sowohl ρ als auch C^2 hermitesch sowie nicht negativ sind und somit (2.42) angewandt werden kann, während für den zweiten Schritt (3.28) und $\text{Sp} \{ \rho \} = 1$ gebraucht wird.

W hingegen lässt sich mit den selben Mitteln wie (3.67) beschränken

$$W \leq \max_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.78)$$

Zusammengenommen, und in Anbetracht von (3.29), ergeben dann (3.77) und (3.78) in der Summe (3.73) umgehend

$$|S_{11}| \leq 2 \max_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.79)$$

Entlang der gleichen Argumentationskette findet man für $a = 13$

$$|S_{13}| \leq 2 \max_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.80)$$

Mit Blick auf (3.51) führen (3.67), (3.70), (3.79) sowie (3.80) zu

$$\sum_{a=9}^{14} |S_a| \leq \frac{17}{2} \max_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.81)$$

BERECHNUNG VON S_{15} : Wir beginnen mit der trivialen Umformulierung

$$S_{15} = X + Y + Z + R^2 \quad (3.82)$$

$$X := S_{15} - \alpha \quad (3.83)$$

$$Y := \alpha - \beta \quad (3.84)$$

$$Z := \beta - R^2 \quad (3.85)$$

$$\alpha := (\text{Sp} \{\rho C\})^2 \frac{(N-4)!}{N!} \sum'_{klmn} e_{km}^{ln} \quad (3.86)$$

$$\beta := (\text{Sp} \{\rho C\})^2 \frac{(N-4)!}{N!} \sum'_{kl} \sum'_{mn} e_{km}^{ln} . \quad (3.87)$$

Für $a = 15$ sind alle vier Indizes in (3.19) paarweise verschieden. Damit und mit (3.49) bekommen wir

$$\begin{aligned} S_{15} &= \sum'_{klmn} [h(\pi(k), \pi(l), \pi(m), \pi(n))]_{\Pi} e_{km}^{ln} \\ &= \sum'_{klmn} e_{km}^{ln} \frac{(N-4)!}{N!} \sum'_{\kappa\lambda\mu\nu} h(\kappa, \lambda, \mu, \nu) . \end{aligned} \quad (3.88)$$

Hierbei haben wir im letzten Schritt (3.17) für $K = 4$ benutzt.

Durch den Vergleich von (3.37) und (3.44) erkennt man, dass $\text{Sp} \{\rho C\} = \sum'_{\mu\nu} g(\mu, \nu)$. Daher kann (3.86) mit (3.46) umgeschrieben werden zu

$$\alpha = \sum'_{klmn} e_{km}^{ln} \frac{(N-4)!}{N!} \sum'_{\kappa\lambda} \sum'_{\mu\nu} h(\kappa, \lambda, \mu, \nu) . \quad (3.89)$$

Setzen wir jetzt (3.88) sowie (3.89) in (3.83) ein, finden wir

$$X = X_1 X_2 \quad (3.90)$$

$$X_1 := \sum'_{klmn} e_{km}^{ln} \frac{(N-4)!}{N!} \quad (3.91)$$

$$X_2 := \sum_{klmn \in I_{15}} h(k, l, m, n) - \sum_{klmn \in J} h(k, l, m, n) . \quad (3.92)$$

Um es später einfacher zu haben, verwenden wir in (3.92) anstatt $\kappa, \lambda, \mu, \nu$ besser k, l, m, n als Summationsindizes. Des Weiteren sind die Mengen I_{15} sowie J in (3.19) und (3.20) definiert worden.

Mit (3.47) sowie (3.24) folgt wieder $|e_{km}^{ln}| = 1$. Da die gestrichene Summe über k, l, m, n in (3.91) aus $N!/(N-4)!$ Summanden besteht, schließen wir, dass

$$|X_1| \leq 1 . \quad (3.93)$$

Wie unterhalb von (3.20) diskutiert, entspricht J der disjunkten Vereinigung von I_9, \dots, I_{15} . Das impliziert, dass (3.92) ausgedrückt werden kann als

$$X_2 = - \sum_{a=9}^{14} S'_a \quad (3.94)$$

$$S'_a := \sum_{klmn \in I_a} h(k, l, m, n) . \quad (3.95)$$

Erneut verweisen wir auf (3.47) sowie (3.24) für die Schlussfolgerung $e_{km}^{ln} = 1$ bei $t = 0$. Darum kann S'_a aus (3.95) mit S_a aus (3.49) identifiziert werden, sofern man sich an (3.17) erinnert und $t = 0$ setzt. Weil die Schranke aus (3.81) unabhängig von der Zeit ist, gilt auch

$$\sum_{a=9}^{14} |S'_a| \leq \frac{17}{2} \max_n p_n \Delta_A^2 . \quad (3.96)$$

Letztlich ergibt (3.90) zusammen mit (3.93)-(3.96), dass

$$X \leq \frac{17}{2} \max_n p_n \Delta_A^2 . \quad (3.97)$$

Auf die gleiche Art und Weise formulieren wir (3.84) mittels (3.86) sowie (3.87) um zu

$$Y = Y_1 Y_2 \quad (3.98)$$

$$Y_1 := (\text{Sp} \{\rho C\})^2 \frac{(N-4)!}{N!} \quad (3.99)$$

$$Y_2 := \sum_{klmn \in I_{15}} e_{km}^{ln} - \sum_{klmn \in J} e_{km}^{ln} , \quad (3.100)$$

wobei I_{15} sowie J in (3.19) sowie (3.20) definiert sind.

Werten wir die Spur in der Eigenbasis von C aus, sieht man, dass $|\text{Sp} \{\rho C\}| \leq \|C\|$. Mit (3.28) folgern wir daher

$$|Y_1| \leq 4 \|A\|^2 \frac{(N-4)!}{N!} . \quad (3.101)$$

Mittlerweile ist bekannt, dass $|e_{km}^{ln}| = 1$ und dass J die disjunkte Vereinigung von I_9, \dots, I_{15} ist. Daraus schließen wir unter Verweis auf (3.100), dass

$$|Y_2| \leq \sum_{a=9}^{14} |I_a| . \quad (3.102)$$

Hier bezeichnet $|I_a|$ die Größe, sprich Anzahl der Elemente, der Menge I_a . Aus (3.19) wird schnell ersichtlich, dass $|I_a| = N(N-1)$ für $a = 9, 10$ und $|I_a| = N(N-1)(N-2)$ für $a = 11, \dots, 14$. Das wiederum führt zu

$$\sum_{a=9}^{14} |I_a| = 4N(N-1)(N-3/2) . \quad (3.103)$$

Setzen wir jetzt (3.101)-(3.103) in (3.98) ein, findet man

$$|Y| \leq \|A\|^2 q(N) / N \quad (3.104)$$

$$q(N) := 16 \frac{N}{N-2} \frac{N-3/2}{N-3}. \quad (3.105)$$

Wir merken an, dass die Faktoren in (3.105) mit steigendem N kleiner werden und $q(N) \leq q(6) = 36$ für $N \geq 6$. Diese Einsichten sowie (3.29) ergeben dann

$$|Y| \leq 36 \|A\|^2 / N = 9 \Delta_A^2 / N. \quad (3.106)$$

Mit der Hilfe von (3.44) folgern wir aus (3.85) sowie (3.87), dass

$$Z = Z_1 Z_2 \quad (3.107)$$

$$Z_1 := (\text{Sp} \{\rho C\})^2 \sum'_{kl} \sum'_{mn} e_{km}^{ln} \quad (3.108)$$

$$Z_2 := \frac{(N-4)!}{N!} - \frac{1}{N^2(N-1)^2}. \quad (3.109)$$

Wie schon zuvor nutzen wir, dass $|\text{Sp} \{\rho C\}| \leq 2 \|A\|$, dass die beiden Doppelsummen in (3.108) exakt $N^2(N-1)^2$ Summanden besitzen sowie dass $|e_{km}^{ln}| = 1$. Daraus leiten wir ab

$$|Z_1| \leq 4 \|A\|^2 N^2(N-1)^2. \quad (3.110)$$

Setzt man nun (3.109) sowie (3.110) in (3.107) ein, führt dies zu der gleichen oberen Schranke für $|Z|$ wie für $|Y|$ in (3.104). Deshalb erhalten wir, wie in (3.106), auch hier

$$|Z| \leq 36 \|A\|^2 / N = 9 \Delta_A^2 / N. \quad (3.111)$$

FINALES RESULTAT: Mit der Definition (3.25) gilt

$$[\xi_\pi^2(t)]_\Pi = \left[(\langle A \rangle_{\rho(t)})^2 \right]_\Pi - ([\langle A \rangle_{\rho(t)}]_\Pi)^2 \quad (3.112)$$

und mit (3.33), dass

$$([\langle A \rangle_{\rho(t)}]_\Pi)^2 = Q^2 + 2QR + R^2. \quad (3.113)$$

Setzen wir (3.64) sowie (3.82) in (3.48) ein, so finden wir

$$\left[(\langle A \rangle_{\rho(t)})^2 \right]_\Pi = Q^2 + 2QR + \sum_{a=9}^{14} S_a + X + Y + Z + R^2. \quad (3.114)$$

Dann schließen wir mit (3.112)-(3.114), dass

$$[\xi_\pi^2(t)]_\Pi = \sum_{a=9}^{14} S_a + X + Y + Z, \quad (3.115)$$

und mit (3.81), (3.97), (3.106) sowie (3.111), dass

$$[\xi_\pi^2(t)]_\Pi \leq \Delta_A^2 \left(17 \max_n p_n + 18/N \right) \quad (3.116)$$

für $N \geq 6$. Wir merken an, dass $N^{-1} \leq \max_n p_n$, womit

$$[\xi_\pi^2(t)]_\Pi \leq (6\Delta_A)^2 \max_n p_n \quad (3.117)$$

für $N \geq 6$. Dies entspricht schlussendlich der angestrebten, zweiten Relation in (3.6) aus dem übergeordneten Kapitel.

3.3 Der Fall eines stark besetzten Vielteilchen-Niveaus

Stark besetzte Vielteilchen-Niveaus sind in quantenmechanischen Vielteilchensystemen aufgrund der hohen Dichte der Energieniveaus, wir erinnern uns an Kap. 2.1, sehr unwahrscheinlich. Der Leser mag nun einwenden, dass solche Situationen doch schon im Rahmen der Bose-Einstein-Kondensation experimentell realisiert wurden. Aber die Voraussetzung für Bose-Einstein-Kondensation ist nur, dass die Besetzungszahl des Ein-Teilchen Grundzustands signifikant wird. Das wiederum impliziert nicht, dass auch der Vielteilchen-Grundzustand stark besetzt ist, da viele Produktzustände im Fockraum die gleiche Besetzungszahl des Ein-Teilchen-Grundzustands aufweisen, während die übrigen, nicht kondensierten Teilchen ganz unterschiedliche Anregungen besitzen können. Darauf wurde bereits in [51] hingewiesen. Tatsächlich gestaltet es sich schwierig Experimente zu finden, in denen eine starke Besetzung eines Vielteilchen-Energieniveaus relevant ist. Kandidaten sind Systeme mit großen Lücken im Energiespektrum bei niedrigen Anregungsenergien, sprich sehr kalten Temperaturen, oder aber auch solche mit hoch entarteten Energieniveaus. Im letzteren Fall könnte jeder Energieeigenzustand weiterhin schwach besetzt sein, während der Eigenraum des entsprechenden Niveaus aufgrund der hohen Entartung stark besetzt ist.

Ziel dieses Kapitels ist die Verallgemeinerung der typischen Relaxationsdynamik aus Kap. 3.2 auf den Fall eines stark besetzten Vielteilchen-Energieniveaus. Wir betonen, dass eine typische Dynamik für zwei oder mehr stark besetzte Niveaus zwar denkbar ist, betrachten diese Fälle aber aus zwei Gründen nicht: Auf der einen Seite sind Situationen mit mehr als einem stark besetzten Energieniveau in Anbetracht der obigen Diskussion experimentell wohl kaum von Interesse; auf der anderen Seite findet für diese Fälle keine Equilibration mehr statt, da dann nicht abklingende Rabi-Oszillationen auftreten würden (siehe Kap. 2).

Wie zuvor, siehe beispielsweise (3.1), lautet die Dynamik von Erwartungswerten

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} := \sum_{m,n=0}^N A_{mn} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} = \sum_{m,n=0}^N \text{Sp} \{ P_m \rho P_n A \} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}. \quad (3.118)$$

Im Gegensatz zum vorigen Kapitel betrachten wir jetzt einen $(N+1)$ dimensionalen Hilbertraum, jedoch nur aus Gründen der bequemerer Notation. So bezeichnet $n=0$ das durch starke Besetzung ausgezeichnete Energieniveau. Wenn die makroskopische Besetzungswahrscheinlichkeit dieses Niveaus experimentell relevant ist, d.h. in der Präparation des Systems adressierbar und mit messbaren Konsequenzen, erscheint es unphysikalisch das stark besetzte mit allen anderen gleichberechtigt zu permutieren. Aus diesem Grund nehmen wir $n=0$ von den Permutationen aus und betrachten, wie in Kap. 3.2, nur Permutationen von $\{1, \dots, N\}$. Dementsprechend definieren wir

$$H_{\pi} := \sum_{n=1}^N E_n P_{\pi(n)} + E_0 P_0 = \sum_{n=1}^N E_{\pi^{-1}(n)} P_n + E_0 P_0. \quad (3.119)$$

Auch hier sind die fünf Eigenschaften aus Kap. 3.2 unter Permutationen erhalten, aber die Permutationen verletzen eben auch weiterhin die lokale Struktur der echten Operatoren. Trotz dieser Parallelen weicht die typische Relaxationsdynamik, durch $[\dots]_{\Pi}$ über alle $\pi \in \Pi$ gemittelt, im Falle eines stark besetzten Energieniveaus von der aus (3.7) ab:

$$\left[\langle A \rangle_{\rho(t)} \right]_{\Pi} = \langle A \rangle_{\bar{\rho}} + F(t) \left(\text{Sp} \left\{ \tilde{\rho} \tilde{A} \right\} - \text{Sp} \left\{ \bar{\rho} \tilde{A} \right\} \right) + 2 \text{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \text{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\} \right] \quad (3.120)$$

$$P_m \hat{\rho} P_n := \begin{cases} 0 & \text{falls } m = 0 \text{ und } n = 0 \\ P_m \rho P_n & \text{sonst} \end{cases}, \quad \hat{A} \text{ gleichermaßen,} \quad (3.121)$$

$$P_m \tilde{\rho} P_n := \begin{cases} 0 & \text{falls } m = 0 \text{ oder } n = 0 \\ P_m \rho P_n & \text{falls } m, n \geq 1 \end{cases}, \quad \tilde{A} \text{ gleichermaßen} \quad (3.122)$$

$$F(t) := \left(N \left| \tilde{\phi}(t) \right|^2 - 1 \right) / (N - 1), \quad (3.123)$$

$$\tilde{\phi}(t) := N^{-1} \sum_{n=1}^N e^{i(E_n - E_0)t/\hbar}. \quad (3.124)$$

Der Überstrich bedeutet, in Anlehnung an vorige Kapitel, $P_m \bar{\rho} P_n = P_m \tilde{\rho} P_n \delta_{mn}$. Bei genauer Betrachtung von $F(t)$ in (3.123) sieht man, dass der erste Teil der typischen Relaxationsdynamik in (3.120) exakt (3.7) reproduziert, während der letzte Summand davon abweicht. Nichtsdestotrotz gelingt es uns auch hier zu zeigen, dass die Varianz verschwindend gering ist:

$$\left[\xi_{\pi}^2(t) \right]_{\Pi} = \left[(\langle A \rangle_{\rho(t)})^2 \right]_{\Pi} - ([\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi})^2 \leq 244 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 6. \quad (3.125)$$

Deshalb entspricht (3.120) einer guten Approximation für die überwiegende Mehrzahl aller durch (3.119) erzeugten Dynamiken. Erneut gibt es keinen Grund, weshalb die echte Relaxationsdynamik nicht zu dieser typischen Mehrheit gehören sollte; es sei denn, die Permutationen verletzen z.B. die Lokalisierungsstruktur des Anfangszustands (vgl. Kap. 3.2). Die Herleitung von (3.120)-(3.125) wird wegen des geringen physikalischen Erkenntnisgewinns auf den Anhang 3.3.1 verschoben.

3.3.1 Anhang 3.B

Zur besseren Lesbarkeit setzen wir in diesem Anhang Definitionen und Techniken aus den vorhergehenden Kapiteln voraus und sehen von übermäßig vielen Querverweisen ab. Des Weiteren unterdrücken wir die explizite Indikation, welche Indizes unterhalb des Mittels $[\dots]_{\Pi}$ permutiert werden, da wir uns wie in Kap. 3.2.1 durchgehend für eine Permutation der Energieeigenräume anstatt

der Eigenwerte entscheiden; d.h. wir schreiben beispielsweise $[A_{mn}]_{\Pi} e_m^n$ anstatt $[A_{\pi(m)\pi(n)}]_{\Pi} e_m^n$. Schlussendlich betonen wir, dass die Abschätzungen in diesem Kapitel bewusst nicht immer so streng wie möglich gewählt werden, sondern eher mit Hinblick auf eine bessere Darstellbarkeit. Für makroskopische Vielteilchensysteme sind die dadurch auftretenden Faktoren in den oberen Schranken ohnehin physikalisch irrelevant.

Berechnung des Mittelwerts (3.120): Die Dynamik (3.118) formulieren wir um zu

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} := \sum_{m,n=0}^N A_{mn} e_m^n = \sum_{n=0}^N A_{nn} e_n^n + \sum_{\substack{m,n=0 \\ m \neq n}}^N A_{mn} e_m^n. \quad (3.126)$$

Damit kann man die Berechnung des Mittelwerts dieser in zwei Teile aufspalten

$$[\langle A \rangle_{\rho(t)}]_{\Pi} = \sum_{n=0}^N [A_{nn}]_{\Pi} + \sum_{\substack{m,n=0 \\ m \neq n}}^N [A_{mn}]_{\Pi} e_m^n =: t_1 + t_2. \quad (3.127)$$

Diese werten wir nun getrennt voneinander mit den Mitteln aus Anhang 3.2.1 aus

$$t_1 = A_{00} + \sum_{n=1}^N [A_{nn}]_{\Pi} = \sum_{\nu=0}^N A_{nn} = \langle A \rangle_{\bar{\rho}}. \quad (3.128)$$

t_2 dagegen teilen wir erneut für die weitere Betrachtung in drei Terme auf

$$t_2 = \sum_{m=1}^N [A_{m0}]_{\Pi} e_m^0 + \sum_{n=1}^N [A_{0n}]_{\Pi} e_0^n + \sum_{\substack{m,n=1 \\ m \neq n}}^N [A_{mn}]_{\Pi} e_m^n =: t_{21} + t_{22} + t_{23}. \quad (3.129)$$

Für den ersten Ausdruck finden wir unter Gebrauch der Definitionen (3.121) sowie (3.124), dass

$$t_{21} = \sum_{m=1}^N e_m^0 \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N A_{\mu 0} = \tilde{\phi}^*(t) \text{Sp} \left\{ P_0 \hat{A} \rho P_0 \right\}. \quad (3.130)$$

Die Analyse von t_{22} verläuft ganz analog und liefert

$$t_{22} = \tilde{\phi}(t) \text{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\}. \quad (3.131)$$

Nun lassen sich t_{21} sowie t_{22} zusammenfassen als

$$t_{21} + t_{22} = 2 \text{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \text{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\} \right]. \quad (3.132)$$

Den Term t_{23} haben wir bereits in (3.35) berechnet. Jetzt drücken wir das Ergebnis mit den neuen Definitionen (3.122) sowie (3.123) aus:

$$t_{23} = F(t) \left(\text{Sp} \left\{ \tilde{\rho} \tilde{A} \right\} - \text{Sp} \left\{ \bar{\rho} \tilde{A} \right\} \right). \quad (3.133)$$

Setzen wir (3.132) sowie (3.133) in (3.129) ein und den dann erhaltenen Term zusammen mit (3.128) in (3.127) ein, so finden wir den angestrebten Ausdruck (3.120) aus dem übergeordneten Kapitel für die gemittelte Relaxationsdynamik bezüglich aller Permutationen.

Berechnung der Varianz (3.125): Wie bereits zuvor erwähnt, wollen wir ausnutzen, dass sich Teile der Varianz auf Kap. 3.2.1 zurückführen lassen. Dafür bemerken wir, dass

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} + A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{m=1}^N A_{m0} e_m^0 \right], \quad (3.134)$$

$$\left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi} = \langle A \rangle_{\tilde{\rho}} + F(t) \left(\operatorname{Sp} \{ \tilde{\rho} \tilde{A} \} - \operatorname{Sp} \{ \tilde{\rho} \tilde{A} \} \right). \quad (3.135)$$

Damit lässt sich dann der Mittelwert (3.120) schreiben als

$$\left[\langle A \rangle_{\rho(t)} \right]_{\Pi} = \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi} + A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \} \right]. \quad (3.136)$$

Folgerichtig finden wir die für die Varianz benötigten Ausdrücke

$$\begin{aligned} \left[\langle A \rangle_{\rho(t)}^2 \right]_{\Pi} &= \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)}^2 \right]_{\Pi} + \left[2 \langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \left(A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{m=1}^N A_{m0} e_m^0 \right] \right) \right]_{\Pi} \\ &+ \left[\left(A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{m=1}^N A_{m0} e_m^0 \right] \right)^2 \right]_{\Pi} =: S_{11} + S_{12} + S_{13}, \end{aligned} \quad (3.137)$$

$$\begin{aligned} \left[\langle A \rangle_{\rho(t)} \right]_{\Pi}^2 &= \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi}^2 + 2 \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi} \left(A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \} \right] \right) \\ &+ \left(A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \} \right] \right)^2 =: S_{21} + S_{22} + S_{23}. \end{aligned} \quad (3.138)$$

Wir haben die Summanden S_{ij} definiert, weil wir nun anhand dieser, Stück für Stück, die Varianz bestimmen wollen

$$\begin{aligned} \left[\xi_{\pi}^2(t) \right]_{\Pi} &= \left[\left(\langle A \rangle_{\rho(t)} \right)^2 \right]_{\Pi} - \left(\left[\langle A \rangle_{\rho(t)} \right]_{\Pi} \right)^2 \\ &= (S_{11} - S_{21}) + (S_{12} - S_{22}) + (S_{13} - S_{23}). \end{aligned} \quad (3.139)$$

Ähnlich wie in (3.28) ergibt sich zudem

$$\left\| \tilde{A} \right\| = \left\| \sum_{m=1}^N P_m A \sum_{n=1}^N P_n \right\| \leq \|A\|, \quad \left\| \hat{A} \right\| = \|A - P_0 A P_0\| \leq 2 \|A\|. \quad (3.140)$$

BERECHNUNG VON $(S_{11} - S_{21})$: Wir stellen fest, dass wir den ersten Teil der Varianz

$$(S_{11} - S_{21}) = \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)}^2 \right]_{\Pi} - \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi}^2 \quad (3.141)$$

bereits in (3.117) abgeschätzt haben. Dementsprechend gilt für $N \geq 6$, dass

$$(S_{11} - S_{21}) \leq (6\Delta_A)^2 \max'_n p_n, \quad (3.142)$$

wobei der Strich indiziert, dass das makroskopisch besetzte Energieniveau $n = 0$ von der Maximierung ausgenommen ist.

BERECHNUNG VON $(S_{12} - S_{22})$: Diese gestaltet sich deutlich anspruchsvoller. Zuerst betrachten wir S_{12} genauer

$$\begin{aligned} S_{12} &= \left[2 \langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \left(A_{00} + 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{m=1}^N A_{m0} e_m^0 \right] \right) \right]_{\Pi} \\ &= 2 \left[\langle A \rangle_{\tilde{\rho}(t)} \right]_{\Pi} A_{00} + 4 \left[\sum_{m,n=1}^N A_{mn} e_m^n \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^N A_{l0} e_l^0 \right] \right]_{\Pi}. \end{aligned} \quad (3.143)$$

Dabei sehen wir schnell, dass der erste Summand dem ersten Teil von S_{22} entspricht, während der hintere noch weiter auszuwerten ist. Um das Mittel $[\dots]_{\Pi}$ hier auszuwerten, müssen wir die disjunkte Unterteilung der Menge aller Tripel $I := \{(l, m, n) \mid l, m, n \in \{1, \dots, N\}\}$ finden, so wie wir das für die Quadrupel in (3.19) getan haben:

$$\begin{aligned} I_1 : l = m = n & & I_2 : l = m, m \neq n \\ I_3 : l = n, m \neq n & & I_4 : m = n, l \neq m \\ I_5 : l, m, n & \text{ paarweise verschieden} \end{aligned} \quad (3.144)$$

Nun definieren wir die Teilsummen

$$M_a := 4 \left[\sum_{m,n,l \in I_a} A_{mn} e_m^n \operatorname{Re} [A_{l0} e_l^0] \right]_{\Pi}, \quad (3.145)$$

welche wir nutzen, um

$$4 \left[\sum_{m,n=1}^N A_{mn} e_m^n \operatorname{Re} \left[\sum_{l=1}^N A_{l0} e_l^0 \right] \right]_{\Pi} = \sum_{a=1}^5 M_a \quad (3.146)$$

kleinschrittig auszuwerten.

Zuerst betrachten wir M_1 sowie M_4 genauer

$$M_1 = \sum_{\nu=1}^N A_{\nu\nu} \operatorname{Re} \left[A_{\nu 0} \frac{4}{N} \sum_{n=1}^N e_n^0 \right], \quad (3.147)$$

$$M_4 = \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\nu} \operatorname{Re} \left[A_{\mu 0} \frac{4}{N} \sum_{n=1}^N e_n^0 \right]. \quad (3.148)$$

Hierbei und auch im Rest dieses Kapitels laufen Summationsindizes gestrichener Summen, wie schon zuvor, von 1 bis N mit der Einschränkung, dass sie paarweise verschieden sind. Jetzt addieren wir die beiden Terme und finden

$$M_1 + M_4 = \sum_{\nu=1}^N A_{\nu\nu} \operatorname{Re} \left[\sum_{\mu=1}^N A_{\mu 0} \frac{4}{N} \sum_{n=1}^N e_n^0 \right] = 4 \langle A \rangle_{\bar{\rho}} \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\} \right]. \quad (3.149)$$

Mit Blick auf (3.138) und (3.135) erkennen wir in (3.149) den zweiten Teil von S_{22} .

Als nächstes wollen wir $|M_2|$ abschätzen. Diese Schranke wird sich als exemplarisch für spätere Überlegungen herausstellen. Nach der Ersetzung $\sum_{\nu\mu}' = \sum_{\mu,\nu=1}^N (1 - \delta_{\mu\nu})$, den Abschätzungen der Realteile sowie der Summation über die Exponentialfunktionen erhält man

$$\begin{aligned} |M_2| &\leq \sum_{\nu=1}^N 4 \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho \tilde{A} \right\} \right| \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho P_0 A \right\} \right| + \sum_{\nu=1}^N 4 \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho P_\nu A \right\} \right| \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho P_0 A \right\} \right| \\ &=: Q + R. \end{aligned} \quad (3.150)$$

Für die Auswertung von Q und R benutzen wir die Cauchy-Schwarz Ungleichung in der Form (2.31) sowie der oberhalb von (2.62). Zudem gebrauchen wir wieder (2.42). Mit diesen Zutaten sowie (2.77) ergibt sich

$$\begin{aligned} Q &\leq 4 \sqrt{\sum_{\nu=1}^N \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho \tilde{A} P_\nu \right\} \right|^2 \sum_{\mu=1}^N \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\mu \rho P_0 A P_\mu \right\} \right|^2} \\ &\leq 4 \sqrt{\max'_n p_n \Delta_A^2} \sqrt{\sum_{\mu=1}^N \operatorname{Sp} \left\{ P_\mu \rho \right\} \operatorname{Sp} \left\{ P_\mu A P_0 \rho P_0 A P_\mu \right\}} \\ &\leq 4 \sqrt{\max'_n p_n \Delta_A^2} \sqrt{\max'_n p_n \operatorname{Sp} \left\{ P_0 \rho P_0 \hat{A}^2 \right\}} \\ &\leq 8 \max'_n p_n \Delta_A^2 \sqrt{\operatorname{Sp} \left\{ P_0 \rho P_0 \right\}} \leq 8 \max'_n p_n \Delta_A^2. \end{aligned} \quad (3.151)$$

Mit den gleichen Techniken gewinnen wir die Schranken für R :

$$R \leq 4 \sqrt{\sum_{\nu=1}^N \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\nu \rho P_\nu A \right\} \right|^2 \sum_{\mu=1}^N \left| \operatorname{Sp} \left\{ P_\mu \rho P_0 A P_\mu \right\} \right|^2} \leq 8 \max'_n p_n \Delta_A^2, \quad (3.152)$$

womit $|M_2|$ sich umgehend beschränken lässt durch

$$|M_2| \leq 16 \max'_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.153)$$

$|M_3|$ besitzt die gleiche Struktur wie $|M_2|$ und lässt sich identisch abschätzen.

Als nächstes betrachten wir

$$|M_5| = \left| \sum'_{\nu\mu\lambda} A_{\nu\mu} \sum'_{lmn} e_m^n \operatorname{Re} [A_{\lambda 0} e_l^0] \frac{4}{N(N-1)(N-2)} \right|. \quad (3.154)$$

Diesen Term ergänzen wir jetzt um geschickt gewählte Nullen:

$$\pm X_1 := \pm \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \sum'_{lmn} e_m^n \operatorname{Re} [A_{\nu 0} e_l^0] \frac{4}{N(N-1)(N-2)}, \quad (3.155)$$

$$\pm X_2 := \pm \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \sum'_{lmn} e_m^n \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_l^0] \frac{4}{N(N-1)(N-2)}, \quad (3.156)$$

$$\pm Y_1 := \pm \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \sum'_{mn} e_m^n \operatorname{Re} \left[\sum_{\lambda=1}^N A_{\lambda 0} e_m^0 \right] \frac{4}{N(N-1)(N-2)}, \quad (3.157)$$

$$\pm Y_2 := \pm \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \sum'_{mn} e_m^n \operatorname{Re} \left[\sum_{\lambda=1}^N A_{\lambda 0} e_n^0 \right] \frac{4}{N(N-1)(N-2)}. \quad (3.158)$$

Mittels dieser eingeschobenen Nullen finden wir unter Verwendung der Dreiecksungleichung sowie der Beobachtung $\frac{1}{N-2} = \frac{1}{N} + \left(\frac{1}{N-2} - \frac{1}{N}\right)$, dass

$$\begin{aligned} & \left| M_5 \pm \sum_{i=1}^2 (X_i + Y_i) - 4F(t) \left(\operatorname{Sp} \{ \tilde{\rho} \tilde{A} \} - \operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} \tilde{A} \} \right) \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \} \right] \right| \\ & =: Z \leq \left| \sum_{i=1}^2 (X_i + Y_i) \right| + \bar{Z}, \end{aligned} \quad (3.159)$$

$$\bar{Z} := \left| \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \sum'_{mn} e_m^n \operatorname{Re} \left[\sum_{\lambda,l=1}^N A_{\lambda 0} e_l^0 \right] \frac{4}{N(N-1)} \left(\frac{1}{N-2} - \frac{1}{N} \right) \right|. \quad (3.160)$$

Nun stellen wir fest, dass

$$\left(\frac{1}{N-2} - \frac{1}{N} \right) = \frac{1}{N} \left(\frac{2}{N-2} \right) \leq \frac{6}{N^2} \quad \forall N \geq 3. \quad (3.161)$$

Diese Beziehung sowie die Techniken zur Abschätzung von M_2 gebrauchen wir für folgende Abschätzung

$$\begin{aligned} \bar{Z} & \leq \left| \sum'_{\nu\mu} A_{\nu\mu} \operatorname{Re} \left[\sum_{\lambda=1}^N A_{\lambda 0} \right] \frac{24}{N} \right| \leq \frac{24}{N} \left| \operatorname{Sp} \{ \tilde{\rho} \tilde{A} \} - \operatorname{Sp} \{ \bar{\rho} \tilde{A} \} \right| \left| \operatorname{Re} \left[\operatorname{Sp} \{ P_0 \rho \hat{A} \} \right] \right| \\ & \leq \frac{24}{N} \Delta_A \sqrt{\operatorname{Sp} \{ P_0 \rho P_0 \} \operatorname{Sp} \{ \hat{A} \rho \hat{A} \}} \leq 48 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 3. \end{aligned} \quad (3.162)$$

Beide $|Y_i|$ lassen sich auf die gleiche Weise wie \bar{Z} , aber mit einem kleineren Wert beschränken

$$|Y_i| \leq 24 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 3. \quad (3.163)$$

Für die Abschätzung der $|X_i|$ hingegen benötigen wir die selben Mittel wie für M_2 in (3.153):

$$|X_i| \leq 16 \max'_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.164)$$

Jetzt setzen wir (3.162), (3.163) sowie (3.164) in (3.159) ein und finden

$$Z \leq 128 \max'_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.165)$$

Dieses Ergebnis wiederum kombinieren wir mit (3.153), (3.149) und (3.143), um schließlich

$$(S_{12} - S_{22}) \leq 160 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad (3.166)$$

für alle $N \geq 3$ zu erreichen. Hierfür wird wiederholt stillschweigend, wie auch im Folgenden, die Dreiecksungleichung verwendet.

BERECHNUNG VON $(S_{13} - S_{23})$: Von der Struktur und den Methoden entspricht diese Berechnung sehr dem vorigen Abschnitt. Zu Beginn werten wir S_{13} weiter aus

$$S_{13} = A_{00}^2 + 2 A_{00} 2 \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\} \right] + M, \quad (3.167)$$

$$M := \left[2 \operatorname{Re} \left[\sum_{m=1}^N A_{m0} e_m^0 \right] 2 \operatorname{Re} \left[\sum_{n=1}^N A_{n0} e_n^0 \right] \right]_{\Pi}. \quad (3.168)$$

Die ersten beiden Summanden identifizieren wir sofort mit den ersten beiden Termen von S_{23} aus (3.138). Damit bleibt der dritte Summand, bezeichnet mit M , zur weiteren Auswertung über. Die hierfür nötige disjunkte Unterteilung der Menge aller Tupel $I := \{(m, n) \mid m, n \in \{1, \dots, N\}\}$ besteht aus nur zwei Elementen, nämlich

$$I_1 : m = n, \quad I_2 : m \neq n. \quad (3.169)$$

Auch hier führen wir wieder Teilsummen

$$M_a := 4 \left[\sum_{m, n \in I_a} \operatorname{Re} [A_{m0} e_m^0] \operatorname{Re} [A_{n0} e_n^0] \right]_{\Pi} \quad (3.170)$$

ein, um $M = M_1 + M_2$ in zwei Schritten zu betrachten. Zuerst suchen wir mit den bekannten Mittel (vgl. z.B. (3.151)) eine obere Schranke für $|M_1|$:

$$|M_1| \leq \sum_{\mu=1}^N |\operatorname{Sp} \{ P_{\mu} \rho P_0 A P_{\mu} \}|^2 \leq 8 \max'_n p_n \Delta_A^2. \quad (3.171)$$

Dann schauen wir uns M_2 genauer an

$$M_2 = \frac{4}{N(N-1)} \sum'_{\nu\mu} \sum'_{mn} \operatorname{Re} [A_{\nu 0} e_m^0] \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_n^0], \quad (3.172)$$

welche wir um geschickt gewählte Nullen ergänzen

$$\pm X = \pm \frac{4}{N(N-1)} \sum_{\mu} \sum'_{mn} \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_m^0] \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_n^0], \quad (3.173)$$

$$\pm Y = \pm \frac{4}{N(N-1)} \sum_{\nu\mu} \sum_m \operatorname{Re} [A_{\nu 0} e_m^0] \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_m^0]. \quad (3.174)$$

Zusammengenommen ergibt sich

$$\begin{aligned} Z &:= \left| M_2 \pm X \pm Y - \left(2 \operatorname{Re} \left[\tilde{\phi}(t) \operatorname{Sp} \left\{ P_0 \rho \hat{A} P_0 \right\} \right] \right)^2 \right| \\ &\leq |X| + |Y| + |\bar{Z}|, \end{aligned} \quad (3.175)$$

$$\bar{Z} := \frac{4}{N} \left(\frac{1}{N-1} - \frac{1}{N} \right) \sum_{\nu\mu} \sum_{mn} \operatorname{Re} [A_{\nu 0} e_m^0] \operatorname{Re} [A_{\mu 0} e_n^0]. \quad (3.176)$$

Jetzt stellen wir fest, dass

$$\left(\frac{1}{N-1} - \frac{1}{N} \right) = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{N-1} \right) \leq \frac{2}{N^2} \quad \forall N \geq 2, \quad (3.177)$$

womit wir unter Querverweis auf Methoden aus (3.162) die nachstehende Schranke erhalten

$$|\bar{Z}| \leq 16 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 2. \quad (3.178)$$

Ganz ähnlich lässt sich $|Y|$ abschätzen:

$$|Y| \leq 16 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 2, \quad (3.179)$$

während wir für $|X|$ die Methodik aus (3.171) für $|M_1|$ einsetzen, um

$$|X| \leq 8 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad (3.180)$$

zu finden. Nun setzen wir (3.178), (3.179) sowie (3.180) in (3.175) ein und bekommen

$$Z \leq 40 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad \forall N \geq 2. \quad (3.181)$$

Dieses Ergebnis wiederum kombinieren wir mit (3.171), (3.167) sowie (3.138), um schließlich

$$(S_{13} - S_{23}) \leq 48 \max'_n p_n \Delta_A^2 \quad (3.182)$$

für alle $N \geq 2$ zu erreichen.

ABSCHLIESSENDE SCHRANKE DER VARIANZ: Schlussendlich müssen wir nur noch unsere Zwischenergebnisse (3.142), (3.166) sowie (3.182) in (3.139) einsetzen um das Ergebnis (3.125) für die Varianz zu finden.

4 Dynamische Typikalität

Neben der Frage, warum Vielteilchensysteme zum thermodynamischen Gleichgewicht streben, kann man sich fragen, wieso Experimente an ihnen zu unterschiedlichen Zeitpunkten sowie an verschiedenen Orten mittels weniger makroskopischer Parameter reproduzierbar sind, obwohl die mikroskopischen Details weitgehend unbekannt oder unkontrollierbar sind und die Dynamik chaotisch ist. Einen ersten entscheidenden Schritt zur Beantwortung dieser Frage haben Bartsch und Gemmer [12] geleistet. Sie haben gezeigt, dass die überwiegende Mehrheit aller reinen Zustände, welche zu Beginn der Zeitentwicklung einen sehr ähnlichen Erwartungswert bezüglich einer generischen Observablen aufweisen, sehr ähnliche Erwartungswerte bezüglich dieser Observablen zu jedem späteren Zeitpunkt besitzt; unter der Voraussetzung, dass der relevante Hilbertraum von großer, aber endlicher Dimension ist. Im Beweis dieser Aussage wird eine technische Annahme gebraucht, welche strenggenommen nur für anfängliche Erwartungswerte nah am mikrokanonischen Gleichgewicht gilt. Im nächsten Kapitel werden wir eine signifikante Erweiterung dieses Resultats vornehmen.

4.1 Anfangszustände mit vorgegebener Messstatistik bezüglich kommutierender Observablen

Wir betrachten die Menge aller Anfangszustände, welche nun sowohl rein als auch gemischt sein dürfen und die für alle möglichen Messausgänge eines Satzes kommutierender Observablen die selben Erwartungswerte beziehungsweise Projektionswahrscheinlichkeiten (vgl. (2.83)) aufweisen. Ähnlich wie in [12] zeigen wir dann, dass die überwiegende Mehrzahl dieser Zustände zu jedem späteren Zeitpunkt sehr ähnliche Erwartungswerte für eine beliebige Observable besitzt. Aber im Unterschied zu [12] kann die Observable jetzt verschieden von denen, welche den Anfangszustand bestimmen, sein. Zudem kann die betrachtete Dynamik von einem beliebigen, sogar zeitabhängigen Hamiltonoperator erzeugt werden.

Sowohl die Vorarbeiten [36, 37, 38] als auch [52, 53, 54] haben gewisse Parallelen zu unserer folgenden analytischen Ausarbeitung. Dennoch sind die zentralen physikalischen Schlussfolgerungen wie auch die technischen Methoden verschieden.

Wie schon zuvor soll der relevante Hilbertraum von großer, aber endlicher Dimension D sein. Der Anfangszustand des Systems wird im Hinblick auf die kommutierenden Observablen spezifiziert, deren gemeinsame Eigenräume mit \mathcal{H}_n , wobei $n = 1, \dots, \mathcal{N}$, bezeichnet werden. Dementsprechend erfüllen die Projektoren \mathcal{P}_n auf diese Unterräume \mathcal{H}_n wie üblich $\mathcal{P}_m \mathcal{P}_n = \delta_{mn} \mathcal{P}_n$ sowie $\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{P}_n = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$. Die Dimensionen der \mathcal{H}_n sind gegeben durch

$$d_n = \text{Sp} \{ \mathcal{P}_n \} \quad (4.1)$$

und ergeben $D = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} d_n$.

Mit der Dichtematrix $\rho(0)$ (rein oder gemischt) zum Startzeitpunkt $t = 0$ und unter der Assoziation von Projektoren \mathcal{P}_n mit Observablen finden wir, wie in

(2.83), die entsprechenden Erwartungswerte beziehungsweise Projektionswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_n = \text{Sp} \{ \rho(0) \mathcal{P}_n \} \quad (4.2)$$

mit $\mathbf{p}_n \geq 0$ sowie $\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \mathbf{p}_n = 1$. Im Zentrum unserer Analyse wird die Menge aller Anfangszustände $\rho(0)$ stehen, welche die \mathcal{N} Bedingungen (4.2) für beliebige, aber feste Wahrscheinlichkeiten $\{\mathbf{p}_n\}_{n=1}^{\mathcal{N}}$ erfüllen.

Physikalisch gesprochen haben wir hauptsächlich quantenmechanische Vielteilchensysteme im Kopf, in denen, nach von Neumann [6], eine simultane Messung von zwei oder mehr (fast) kommutierenden Observablen möglich ist. Oft werden einige oder sogar alle dieser Observablen makroskopischen Größen, beispielsweise dem Druck, entsprechen und eine von ihnen wird in der Regel der grobkörnige Hamiltonoperator selbst sein. Mit grobgekörntem Hamiltonoperator bezeichnen wir den Projektor auf die Energieschale $I_E := [E - \Delta_E, E]$, welcher folglich nach Trunkierung auf den relevanten Hilbertraum $\mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ entspricht. Es ist nicht realistisch, dass man die dicht liegenden Energieniveaus und zugehörigen Zustände innerhalb dieses Intervalls experimentell auflösen kann. Obwohl ein rigoroser Beweis der benötigten (approximativen) Vertauschung der Observablen im Allgemeinen sehr anspruchsvoll ist, wird das Konzept häufig als plausible Arbeitshypothese verwendet [8, 55, 56, 57, 58, 59, 60]. In diesen Referenzen wird auch diskutiert, wie Operatoren, von denen wir aus physikalischen Gründen annehmen, dass sie zumindest nahezu kommutieren, durch kommutierende genähert werden können; etwas, das wir von nun intuitiv voraussetzen. Beispielsweise kann es sich um mehrere makroskopische Observablen handeln, die gleichzeitig gemessen werden können, oder um eine mikroskopische Observable zusammen mit dem makroskopischen, grobgekörnten Hamiltonian: In der Tat erscheint es vernünftig anzunehmen, dass zum Beispiel die Messung der Geschwindigkeit eines Teilchens die Energieverteilung des Vielteilchensystems praktisch unverändert lässt, während man von mehreren mikroskopischen Observablen nicht erwartet, dass sie vertauschen, nicht einmal approximativ. Gewissermaßen gleicht diese Annahme bezüglich der Observablen der ETH: Die Messausgänge der Observablen sind eine glatte und in der Regel monotone Funktion der Energie. Selbst wenn die betrachteten Observablen jetzt nicht exakt mit dem grobgekörnten Hamiltonian kommutieren, garantiert dies heuristisch, dass alle Zustände mit gleichem anfänglichem Messwert der Observable nahezu dieselbe Energie aufweisen. Würden die Größen nicht (quasi)kommutieren, wären alle nachfolgenden Resultate nur für den Hochtemperaturlimes (Gleichbesetzung aller Energieniveaus) erwartbar. Wir betonen aber, dass ein Vertauschen der Observablen mit dem grobgekörnten Hamiltonoperator nicht impliziert, dass unser Anfangszustand stationär ist und die Wahrscheinlichkeiten \mathbf{p}_n Erhaltungsgrößen sind; zum einen da die Observablen nicht mit dem vollen Hamiltonian kommutieren, welcher die zeitliche Dynamik induziert, aber vor allem da dieser zeitabhängig sein kann. Ein einfaches Beispielszenario, in dem zuerst thermodynamische Größen gemessen werden und dann durch rapide äußerliche Veränderung des Hamiltonoperators (engl. Quench) eine Nichtgleichgewichtssituation

geschaffen wird, ist somit von unserem Ansatz abgedeckt.¹³ Schließlich sollte dem Leser nach dieser Diskussion deutlich geworden sein, dass die Projektoren \mathcal{P}_n sowie Wahrscheinlichkeiten \mathbf{p}_n trotz ähnlicher Notation verschieden zu denen aus (2.1) sowie (2.6) in Kap. 2.1 sind; und während N in den vorherigen Kapiteln der Anzahl der Energieeigenräume entspricht, bezeichnet \mathcal{N} hier die Anzahl der gemeinsamen Eigenräume der kommutierenden Observablen.

Schon in (2.84) haben wir erörtert, dass realistische Messungen nur eine begrenzte Anzahl an möglichen Messausgängen besitzen. Nun kann die Anzahl gemeinsamer Eigenräume \mathcal{N} der kommutierenden Observablen größer als die Anzahl der Messausgänge N_A einer einzelnen sein. Auf der anderen Seite sollte aber auch die Anzahl der kommutierenden Observablen realistisch bleiben. Damit gilt für Anzahl der Eigenräume die vernünftige Schranke

$$\mathcal{N} \leq 10^{20}. \quad (4.3)$$

Im Prinzip sind auch sehr kleine \mathcal{N} denkbar und im Weiteren zugelassen. Der Extremfall entspricht einer Observablen mit nur zwei verschiedenen Messausgängen, $\mathcal{N} = 2$.

In den Kapiteln zuvor wurde ebenfalls diskutiert, dass für generische makroskopische Systeme der relevante Hilbertraum exponentiell groß in der Anzahl der Freiheitsgrade f ist. Beispielsweise kann \mathcal{H} der makroskopisch kleinen, aber mikroskopisch großen Energieschale entsprechen, deren Dimension dann exponentiell groß in der Anzahl der Freiheitsgrade f ist. Folglich muss mindestens ein Unterraum \mathcal{H}_n eine extrem hohe Dimension d_n aufweisen. Im Allgemeinen erscheint es plausibel anzunehmen, dass viele oder sogar alle \mathcal{H}_n eine sehr große Dimension d_n besitzen, zumindest solange keine Besonderheiten wie auflösbare Lücken in den Eigenwertspektren der Observablen vorliegen. Natürlich können, selbst wenn alle d_n groß sind, einige viel größer als andere sein.

Im Gegensatz zu den eingangs erwähnten vorangegangenen Veröffentlichungen zu dieser Thematik berücksichtigen wir, dass, wie in Kap. 2.2 ausgeführt, experimentell keine Erwartungswerte, sondern die volle Statistik der Messausgänge ermittelt werden. Aber auch diese Information ist in Anbetracht der Dimension D des Hilbertraums und der Anzahl der gemeinsamen Eigenräume \mathcal{N} weit davon entfernt, den wirklichen mikroskopischen Anfangszustand $\rho(0)$ eindeutig festzulegen.

Die Zeitentwicklung des gegebenen Anfangszustands $\rho(0)$ wird selbstverständlich, wie bekannt, durch die übliche Schrödinger oder von Neumann Gleichung gegeben. Für unser Vorgehen in diesem Kapitel ist es günstig das Heisenbergbild zu wählen, um den zeitabhängigen Erwartungswert einer beliebigen Observable A auszudrücken

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} := \text{Sp} \{ \rho(0) A_t \} \quad (4.4)$$

¹³Aus diesem Blickwinkel sind die Annahmen der vorhergehenden Resultate zur dynamischen Typikalität (Nähe zum Gleichgewicht zum Startzeitpunkt oder keine zu starke Fokussierung der Zustände auf den Rand des Spektrums der Observablen) vielleicht keine praktische Einschränkung. Denn das Szenario des Quenchs würde doch diese Annahmen zum initialen Zeitpunkt garantieren und trotzdem für eine interessante Nichtgleichgewichtsdynamik sorgen.

$$A_t := \mathcal{U}_t^\dagger A \mathcal{U}_t. \quad (4.5)$$

Hierbei stellt \mathcal{U}_t den quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator dar. Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren H nimmt dieser Propagator \mathcal{U}_t , wie oberhalb von (2.3), die einfache Form $\exp\{-iHt/\hbar\}$ an. Aber im Weiteren lassen wir auch zeitabhängige Hamiltonoperatoren in der Zeitentwicklung zu. Insbesondere muss das System weder thermalisieren noch equilibrieren. Ferner unterliegt die Observable A selbstredend den selben physikalischen Anforderungen aus den vorhergehenden Kapiteln.

Im Wesentlichen funktioniert unser Ansatz wie folgt: Wir beginnen damit alle Anfangszustände, welche mit unserer Kenntnis von (4.2) über die Ausgangssituation kompatibel sind, auf verschiedene Untermengen zu verteilen. Der Grund hierfür liegt darin, dass die von uns verwendete Methode nicht alle diese unterschiedlichen Dichtematrizen gleichzeitig erfassen kann; weshalb wird im weiteren Verlauf deutlich. Als nächstes zeigen wir, dass die überwiegende Mehrheit aller $\rho(0)$ innerhalb einer jeden Untermenge sehr ähnliche Erwartungswerte in (4.4) für beliebige, aber feste A_t aufweist. Schließlich werden wir dann sehen, dass der Mittelwert der Erwartungswerte aus (4.4) über alle $\rho(0)$ aus einer Untermenge tatsächlich für alle Untermengen identisch ist. Dementsprechend müssen die Erwartungswerte in (4.4) für nahezu alle $\rho(0)$, welche (4.2) genügen, sehr ähnlich sein. Um die Ähnlichkeit von (4.4) für die meisten $\rho(0)$ einer Untermenge zu zeigen, werden wir gewisse Annahmen tätigen, welche aber die Anwendbarkeit physikalisch nicht signifikant einschränken. Diese Anforderungen sind ebenfalls für alle Untermengen und somit für alle $\rho(0)$, die (4.2) erfüllen, identisch.

Wir fangen mit der Definition von U_n als beliebiger unitärer Transformation innerhalb eines Unterraums \mathcal{H}_n an; d.h. $U_n : \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_n$ sowie $U_n^\dagger U_n = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_n}$, mit $\mathbb{1}_{\mathcal{H}_n}$ der Einheitsmatrix im Unterraum \mathcal{H}_n . Dieser Operator U_n kann natürlich durch eine direkte Summe mit der Nullmatrix auf dem übrigen Hilbertraum $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_n$ auch auf dem vollen Hilbertraum \mathcal{H} definiert werden. Fortan bezeichnet das selbe Symbol U_n nun einen Operator auf \mathcal{H} mit den zentralen Eigenschaften, dass $U_n^\dagger U_n = \mathcal{P}_n$ sowie $U_n \mathcal{P}_m = \mathcal{P}_m U_n = \delta_{mn} U_n$ für alle $m, n \in \{1, \dots, \mathcal{N}\}$. Also können wir schließen, dass

$$U := \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} U_n \quad (4.6)$$

eine unitäre Transformation auf \mathcal{H} darstellt, d.h. $U^\dagger U = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$. Die Menge aller unitären Transformationen U , welche durch alle möglichen Wahlen der U_n in (4.6) generiert wird, bezeichnen wir mit S_U . Schnell verifiziert man, dass jedes $U \in S_U$ mit allen \mathcal{P}_n kommutiert. Folglich, sofern $\rho(0)$ die \mathcal{N} Bedingungen (4.2) erfüllt, wird auch

$$\rho_U(0) := U^\dagger \rho(0) U \quad (4.7)$$

diesen entsprechen und zwar für alle $U \in S_U$.

Jedes $\rho(0)$, das (4.2) genügt, generiert somit eine der oben angekündigten Untermengen, nämlich $S_{\rho(0)} := \{\rho_U(0) \mid U \in S_U\}$. Offensichtlich generieren viele

unterschiedliche $\rho(0)$, welche (4.2) erfüllen, die selben Untermengen $S_{\rho(0)}$. Zudem sind nicht identische Untermengen disjunkt. Auf der anderen Seite enthält die Vereinigung aller dieser Untermengen alle $\rho(0)$, die (4.2) genügen. In Bezug auf die obige Nebenbemerkung über die Notwendigkeit dieser Untermengen weisen wir darauf hin, dass alle $\rho(0)$ aus der selben Untermenge das gleiche Spektrum besitzen, während nicht alle $\rho(0)$ mit dem gleichen Spektrum zur selben Untermenge gehören.

Folgendermaßen weisen wir den $U \in S_U$ eine Wahrscheinlichkeit zu: Für jedes n werden die U_n als gleichförmig verteilt angenommen (sprich nach dem Haar-Maß bezüglich des Unterraums \mathcal{H}_n), d.h. alle aus einem \mathcal{H}_n sind gleich wahrscheinlich und statistisch unabhängig voneinander für unterschiedliche n . Demzufolge wird die Wahrscheinlichkeit für U in (4.6) als die Verbundwahrscheinlichkeit aller U_n definiert, über welche U definiert ist; also ist jede Kombination der U_n in (4.6) mit gleicher Wahrscheinlichkeit realisiert. Das Mittel einer beliebigen von U abhängigen Größe $X(U)$ über alle U nach eben dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung wird fortan durch $[X(U)]_U$ gekennzeichnet.

Intuitiv ist diese Wahl der Wahrscheinlichkeitsverteilung sehr natürlich. In der Tat ist unter dem Gesichtspunkt, dass die Wahrscheinlichkeit eines jeden $\rho_U(0)$ innerhalb seiner Untermenge $S_{\rho(0)}$ der Wahrscheinlichkeit von U entspricht, unsere obige Wahl die einzig konsistente, d.h. nur für sie gilt, dass jedes $\rho(0)$, welches ein und die selbe Untermenge $S_{\rho(0)}$ generiert, auch dieselbe Wahrscheinlichkeitsverteilung auf der entsprechenden Untermenge $S_{\rho(0)}$ definiert.

Als nächstes betrachten wir A sowie t in (4.4) und damit auch A_t in (4.5) als beliebig, aber fest. Im Allgemeinen sollten verschiedene $\rho(0)$, die (4.2) erfüllen, unterschiedliche Erwartungswerte in (4.4) zur Folge haben. Unter Beschränkung auf alle $\rho(0)$, welche zu derselben beliebigen, aber festen Untermenge $S_{\rho(0)}$ gehören, findet man für den Mittelwert sowie die Varianz der Erwartungswerte aus (4.4) das Resultat

$$\mu_t := [\text{Sp} \{ \rho_U(0) A_t \}]_U = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \frac{\mathbf{P}_n}{d_n} \text{Sp} \{ \mathcal{P}_n A_t \}, \quad (4.8)$$

$$\sigma^2 := \left[(\text{Sp} \{ \rho_U(0) A_t \} - \mu_t)^2 \right]_U \leq \lambda \Delta_A^2, \quad (4.9)$$

$$\lambda := 5 \max_n \left(\frac{\mathbf{P}_n}{d_n} \right). \quad (4.10)$$

Die detaillierte Herleitung dieser Ausdrücke ist mühsam sowie nicht sehr erkenntnisreich und wird daher in den Anhang 4.1.1 verschoben.

Wie zu Beginn des vorigen Abschnitts angekündigt, ist die rechte Seite von (4.8) unabhängig von den speziellen Untermengen $S_{\rho(0)}$, über welche der Mittelwert auf der linken Seite durchgeführt wird. Dasselbe gilt für (4.9). Somit gelten die entsprechenden Schlussfolgerungen, auch wenn das $\rho(0)$ zufällig aus allen diesen Untermengen simultan gezogen wird; d.h. für alle $\rho(0)$, die (4.2) genügen. Durch

Ausnutzung der Chebyshev- (oder Markov-) Ungleichung gelangen wir zu dem Resultat

$$\text{W'keit } (|\text{Sp} \{ \rho(0) A_t \} - \mu_t| > \epsilon) \leq \lambda (\Delta_A / \epsilon)^2 \quad (4.11)$$

für ein beliebiges $\epsilon > 0$. Die Wahrscheinlichkeit auf der linken Seite versteht sich als der Anteil all der mit (4.2) kompatiblen $\rho(0)$, für welche $\text{Sp} \{ \rho(0) A_t \}$ um mehr als ϵ vom Mittelwert μ_t abweicht. Wenn wir nun ϵ mit der experimentellen Auflösung δA identifizieren, so impliziert

$$\lambda \ll (\delta A / \Delta_A)^2, \quad (4.12)$$

dass $\text{Sp} \{ \rho(0) A_t \}$ für die überwiegende Mehrheit aller $\rho(0)$, welche (4.2) erfüllen, ununterscheidbar¹⁴ von μ_t ist. Mit Blick auf (4.4) sowie (4.8) bedeutet das, dass alle diese $\rho(0)$ vom praktischen Gesichtspunkt perfekt durch

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp} \{ \rho_{gmk} A_t \}, \quad (4.13)$$

$$\rho_{gmk} := \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \mathbf{p}_n \rho_{mk}^{(n)}, \quad (4.14)$$

$$\rho_{mk}^{(n)} := \frac{1}{d_n} \mathcal{P}_n \quad (4.15)$$

approximiert werden. Unter Verweis auf (4.1) erkennt man, dass $\rho_{mk}^{(n)}$ in (4.15) zu der mikrokanonischen Dichtematrix auf dem Unterraum \mathcal{H}_n korrespondiert. Folglich kann man ρ_{gmk} in (4.14) als verallgemeinertes mikrokanonisches Ensemble betrachten, welches den Wahrscheinlichkeiten \mathbf{p}_n in (4.2) für jeden Unterraum Rechnung trägt.

Mittels der Definitionen (4.1) und (4.2) können wir das Verhältnis \mathbf{p}_n / d_n als durchschnittlichen „Überlapp“ pro Eigenzustand innerhalb eines jeden Unterraums \mathcal{H}_n auffassen. Wir erinnern uns, dass $\mathbf{p}_n \geq 0$, $\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \mathbf{p}_n = 1$ und dass die Gesamtzahl D aller Eigenzustände unvorstellbar groß ist. Damit ist augenscheinlich, dass (4.12) in Anbetracht von (2.5) sowie (4.10) im Allgemeinen erfüllt ist. Beispielsweise würde man oft erwarten (siehe auch unterhalb von (4.3)), dass die Dimension d_n eines jeden Eigenraums \mathcal{H}_n so groß ist, dass (4.12) automatisch und ohne weitere Einschränkung an die \mathbf{p}_n in (4.10) erfüllt ist. Falls einige Unterräume \mathcal{H}_n dennoch von vergleichsweise kleiner Dimension sein sollten, so ist es ausreichend für die Gültigkeit von (4.12), wenn die Wahrscheinlichkeiten \mathbf{p}_n in Bezug zu der geringen Dimension d_n nicht unverhältnismäßig groß sind. Demnach wäre sogar $d_n = 1$ für alle n zulässig, obwohl solche Fälle, in Erinnerung an die Betrachtungen nach (4.3), physikalisch irrelevant erscheinen.

Schließlich ist es möglich unser Resultat auf zwei Arten zu verallgemeinern:

- Es darf einen ausgezeichneten Unterraum \mathcal{H}_n geben, für welchen \mathbf{p}_n unabhängig von der Dimension d_n überhaupt nicht eingeschränkt ist. Mit

¹⁴Die eigentlich notwendige Erweiterung auf verallgemeinerte Unterscheidbarkeitsmaße (vgl. Kap. 2.2) lässt sich prinzipiell mit den selben Argumenten durchführen, wurde hier aber zur besseren Lesbarkeit ausgespart.

anderen Worten kann ein n bei der Maximierung auf der rechten Seite von (4.10) vernachlässigt werden. Das Beispiel ist, wie in den vorherigen Kapiteln, ein durch eine Lücke im Spektrum experimentell adressierbarer Grundzustand mit makroskopisch großer Besetzungswahrscheinlichkeit \mathbf{p}_n . Die Herleitung dieser Erweiterung entspricht einer Kombination aus den Anhängen 2.1.1 sowie 4.1.1 und wird daher ausgelassen.

- Möglicherweise sind nicht alle Wahrscheinlichkeiten \mathbf{p}_n bekannt, sondern nur die mit Indizes $n \in \{1, \dots, \mathcal{N}'\}$, wobei $\mathcal{N}' < \mathcal{N}$. Dementsprechend existieren nur \mathcal{N}' Bedingungen der Form 4.2 mit $\mathbf{p}_n \geq 0$ und $\sum_{n=1}^{\mathcal{N}'} \mathbf{p}_n \leq 1$. Daraus folgt, dass die Vereinigung (direkte Summe) der übrigen Unterräume $\hat{\mathcal{H}} := \mathcal{H}_{\mathcal{N}'+1} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ mit der Wahrscheinlichkeit $\hat{\mathbf{p}} := 1 - \sum_{n=1}^{\mathcal{N}'} \mathbf{p}_n$ populiert ist und dass der Projektor auf diesen Unterraum $\hat{\mathcal{P}} := \mathcal{P}_{\mathcal{N}'+1} + \dots + \mathcal{P}_{\mathcal{N}}$ gegeben ist. Aufgrund dessen kann diese Situation auf die ursprüngliche mit einem neuen, effektiven Wert \mathcal{N} zurückgeführt werden und zwar durch die Wahl $\mathcal{N} = \mathcal{N}' + 1$, $\mathcal{P}_{\mathcal{N}} = \hat{\mathcal{P}}$ sowie $\mathbf{p}_{\mathcal{N}} = \hat{\mathbf{p}}$.

Unter der Annahme, dass die Bedingung (4.12) erfüllt ist, finden wir, dass die Erwartungswerte von A zum Zeitpunkt t auf der linken Seite von (4.13) für die überwiegende Mehrheit aller $\rho(0)$, welche den \mathcal{N} Bedingungen (4.2) genügen, praktisch ununterscheidbar voneinander sind; womit wir bei dem anfangs angekündigten, zentralen Resultat der dynamischen Typikalität angelangt sind.

Es ist anzumerken, dass eine kleine Menge untypischer $\rho(0)$, welche (4.2) erfüllen, spürbar von der Approximation (4.13) abweicht. Weiterhin erinnern wir uns, dass A sowie t in (4.5) beliebig, aber fest sind. Daher wird die untypische Menge üblicherweise für unterschiedliche Zeitpunkte t und/oder unterschiedliche Observablen A verschieden sein. In diesem Zusammenhang verweisen wir darauf, dass die obere Schranke in (4.9) von t unabhängig ist. Da das Mitteln über U und die Integration über t vertauschende Operationen sind, erhalten wir mit (4.9), dass

$$[q_U]_U \leq \lambda \Delta_A^2, \quad (4.16)$$

$$q_U := \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \xi_U^2(t) dt, \quad (4.17)$$

$$\xi_U(t) := \text{Sp} \{ \rho_U(0) A_t \} - \mu_t \quad (4.18)$$

für beliebige $t_2 > t_1 \geq 0$. Weil $q_U \geq 0$, kann man auch hier aus (4.12) sowie (4.16) schließen, dass die Größe q_U für die überwiegende Mehrheit aller $\rho(0)$ verschwindend gering ist. Für jedes dieser $\rho(0)$ muss also auch der Integrand $\xi_U^2(t)$ in (4.17) für alle $t \in [t_1, t_2]$, mit Ausnahme eines vernachlässigbar kleinen Teils an außergewöhnlichen Zeitpunkten, verschwindend gering sein. Für hinreichend kleine λ in (4.12) sind diese außergewöhnlichen Zeitpunkte un beobachtbar selten und damit vernachlässigbar. Daher folgern wir, dass die meisten der $\rho(0)$, die (4.2) erfüllen, für jedes beliebige Zeitintervall sowie beliebige Observablen A sehr ähnliche Erwartungswerte von A während des gesamten Zeitintervalls besitzen.

Man könnte die Ergebnisse dieses Kapitels in Frage stellen, da [61, 62] zeigen, dass die meisten Zustände in einem Vielteilchen-Hilbertraum unphysikalisch sind. Unphysikalisch meint hier, dass sie sich nicht effizient, sprich in einer realistischen Zeit, präparieren lassen. Eine mögliche Intuition dafür ist, dass viele Zustände im Hilbertraum eine komplexe Verschränkung aufweisen, welche sich nicht experimentell realisieren lässt. Diesem Einwand stellen wir zwei Argumente entgegen: Zum einen beinhaltet unsere Grundgesamtheit, bezüglich der wir die Typikalitätsaussagen tätigen, nicht alle Zustände im Hilbertraum, sondern nur solche $\rho(0)$, die (4.2) genügen; es ist wegen der zu Grunde liegenden physikalischen Motivation naheliegend, aber unklar, ob sich all diese Zustände effizient präparieren lassen. Zum anderen haben wir bereits in Kap. 3.1 darauf hingewiesen, dass es natürlich besser wäre, wenn die Grundgesamtheit nur physikalisch relevante Konstituenten besäße; aber lässt sich dies nicht garantieren, so darf es keinen Grund geben, aus dem sich die überwiegende Mehrheit anders als der typische Mittelwert verhält. Ein solcher Grund ist hier nicht erkennbar, im Gegensatz zu Kap. 3.2, wo exponentiell langsam relaxierende Systeme wegen der verletzten Lokalität nicht abgedeckt sind. Diese beiden Argumente legitimieren unsere Ergebnisse trotz des interessanten Einwands.

Formal ist die hergeleitete typische Zeitentwicklung durch die rechte Seite von (4.13) gegeben. Die explizite quantitative Auswertung dieses Ausdrucks hängt jedoch von der konkret betrachteten physikalischen Situation ab und ist im Allgemeinen sehr anspruchsvoll. In der Tat ist es die zentrale Stärke des Typikalitätsansatzes interessante Vorhersagen zu treffen, ohne die spezifische Dynamik zu lösen. In diesem Fall helfen uns die Resultate der dynamischen Typikalität besser zu verstehen, warum wenige makroskopische Parameter ausreichen die Reproduzierbarkeit von experimentellen Messungen trotz vieler unbekannter sowie unkontrollierbarer mikroskopischer Details sicher zu stellen. Die Existenz beobachtbaren chaotischen Verhaltens, wie beispielsweise bei einem klassischen Doppelpendel, widerspricht nicht den hier gefundenen Ergebnissen, da die Anzahl der relevanten Freiheitsgrade des Doppelpendels für dynamische Typikalität zu gering ist; es handelt sich schlichtweg nicht um ein Vielteilchensystem. Dahingegen erscheint die bekannte Illustration des Schmetterlingseffekts, nach dem der Flügelschlag eines Schmetterlings in Brasilien einen Tornado in Texas auslösen kann, in Anbetracht der dynamischen Typikalität zumindest fragwürdig. Was nicht heißt, dass der Autor das morgige Wetter besser als der übliche Nachrichtendienst prognostizieren kann, sondern nur, dass das Wetter in Texas eher von der Großwetterlage über dem südamerikanischen Kontinent als von den mikroskopischen Details eines Schmetterlings in Brasilien abhängt.

Einen expliziten Ausdruck für die typische Dynamik haben wir in Kap. 3.2 gewonnen. Das Resultat enthält einen gewissen Grad an dynamischer Typikalität, da die Relaxationsdynamik (3.7) nur von dem Erwartungswert und nicht den Details des exakten Zustands abhängt, mehrere Zustände also dieselbe Dynamik aufweisen werden. Bei genauer Betrachtung fällt aber ins Auge, dass die Dynamische Typikalität des gegenwärtigen Kapitels typisch bezüglich des Zustands und nicht des Hamiltonoperators ist. Des Weiteren gilt sie auch für exponentiell langsame Relaxation, bei nicht relaxierenden Systemen sowie für

zeitabhängige Hamiltonoperatoren und ist damit deutlich allgemeiner.

Auch auf die numerische Relevanz von dynamischer Typikalität wollen wir hinweisen. Sie rechtfertigt die Ersetzung der numerisch aufwändig zu berechnenden Dynamik eines gemischten Zustands durch die simplere Simulation eines reinen Zustands. Während zuvor die Grundgesamtheit an Zuständen so konstruiert werden musste, dass der gewünschte gemischte Zustand gerade ρ_{gmk} aus (4.13) entspricht, weil ansonsten lediglich reine Zustände in der Grundgesamtheit enthalten waren, so erfordert unser Resultat nur noch, dass der gewünschte gemischte Zustand (4.2) genügt und nicht bekanntermaßen untypisch ist. Für eine tiefergehende Diskussion der numerischen Anwendung wird auf den entsprechenden, von Richter, Steinigeweg sowie Gemmer verfassten, Abschnitt in [13] verwiesen.

4.1.1 Anhang 4.A

In diesem Anhang werden wir die zentralen Gleichungen (4.8)-(4.10) detailliert herleiten. Gleichzeitig bietet er eine beispielhafte Einführung in die Verwendung des Haar-Maßes für die Typikalität.

Für eine vereinfachte Notation benutzen wir die Abkürzungen

$$\rho := \rho(0) , \quad (4.19)$$

$$B := A_t = \mathcal{U}_t^\dagger A \mathcal{U}_t . \quad (4.20)$$

Die Eigenwerte von B sind deshalb identisch zu denen von A . Dasselbe gilt natürlich auch für den Messbereich von B

$$\Delta_A = \Delta_B . \quad (4.21)$$

Herleitung von Gl. (4.8): Für jedes $n \in \{1, \dots, \mathcal{N}\}$ bezeichnen wir mit $\{|n, a\rangle\}_{a=1}^{d_n}$ eine beliebige, aber feste Orthonormalbasis von \mathcal{H}_n . Die Vereinigung aller dieser Basen stellt daher eine Orthonormalbasis von \mathcal{H} dar, d.h.

$$\langle n, a | m, b \rangle = \delta_{mn} \delta_{ab} , \quad (4.22)$$

$$\sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \sum_{a=1}^{d_n} |n, a\rangle \langle n, a| = \mathbb{1}_{\mathcal{H}} . \quad (4.23)$$

Setzen wir nun dreimal $\mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ in die Definition von μ_t aus (4.8) ein und verwenden (4.7), so erhalten wir

$$\begin{aligned} \mu_t &= \left[\sum_{l,j,m,n} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle l, \alpha | U^\dagger | m, a \rangle \langle m, a | \rho | n, b \rangle \langle n, b | U | j, \beta \rangle \langle j, \beta | B | l, \alpha \rangle \right]_U \\ &= \left[\sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle m, \alpha | U^\dagger | m, a \rangle \langle m, a | \rho | n, b \rangle \langle n, b | U | n, \beta \rangle \langle n, \beta | B | m, \alpha \rangle \right]_U . \end{aligned} \quad (4.24)$$

Im letzten Schritt haben wir hier $\langle n, b | U | m, \beta \rangle = \delta_{mn} \langle n, b | U | n, \beta \rangle$ benutzt, da jedes $U \in S_U$, wie unterhalb von (4.6) erörtert, mit allen \mathcal{P}_n kommutiert. Jetzt definieren wir Abkürzungen für die Darstellungen der, oberhalb von (4.6) eingeführten, U_n bezüglich der gewählten Basen

$$U_{n,b\beta} := \langle n, b | U_n | n, \beta \rangle = \langle n, b | U | n, \beta \rangle. \quad (4.25)$$

Damit können wir (4.24) umschreiben zu

$$\mu_t = \sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle m, a | \rho | n, b \rangle \langle n, \beta | B | m, \alpha \rangle [U_{m,a\alpha}^* U_{n,b\beta}]_U. \quad (4.26)$$

Um diesen Ausdruck weiter auszuwerten, beziehen wir uns auf [63]. Dort findet man folgende Formel für den Mittelwert über gleichmäßig (Haar) verteilte unitäre Matrizen:¹⁵

$$[U_{l,a_1 b_1} \dots U_{l,a_m b_m} U_{l,\alpha_1 \beta_1}^* \dots U_{l,\alpha_n \beta_n}^*]_{U_l} = \delta_{mn} \sum_{\Pi, \Pi'} V_{\Pi, \Pi'} \prod_{j=1}^n \delta_{a_j \alpha_{\Pi(j)}} \delta_{b_j \beta_{\Pi'(j)}}. \quad (4.27)$$

Wir übersetzen wörtlich aus [63]: „die Summation läuft über alle Permutationen Π und Π' der Zahlen $1, \dots, n$. Die Koeffizienten $V_{\Pi, \Pi'}$ hängen nur von der zyklischen Struktur der Permutation $\Pi^{-1} \Pi'$ ab. Wir erinnern daran, dass jede Permutation von $1, \dots, n$ eindeutig in disjunkte zyklische Permutationen mit den Zyklenlängen c_1, \dots, c_k (wobei $n = \sum_{j=1}^k c_j$) faktorisiert. Die Aussage, dass $V_{\Pi, \Pi'}$ nur von der zyklischen Struktur von $\Pi^{-1} \Pi'$ abhängt, meint, dass $V_{\Pi, \Pi'}$ nur von den Längen c_1, \dots, c_k der zyklischen Permutationen abhängt, in welche $\Pi^{-1} \Pi'$ zerfällt. Daher können wir anstatt $V_{\Pi, \Pi'}$ genauso V_{c_1, \dots, c_k} schreiben.“ Die Faktoren V_{c_1, \dots, c_k} sind durch die Spalten „CUE“ der Tabellen II sowie IV in [63] gegeben.

Wie bereits unterhalb von (4.7) besprochen, bezeichnet das Symbol $[...]_U$ den Mittelwert über alle U_n innerhalb jedes \mathcal{H}_n bezüglich des Haar-Maßes. Mittelwerte über Haar-Maße in getrennten Eigenräumen sind statistisch unabhängig (siehe ebenfalls unterhalb von (4.7)). Daher zeigt die Anwendung von (4.27) auf (4.26), dass m gleich n sein muss damit der Mittelwert nicht verschwindet

$$\begin{aligned} \mu_t &= \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle n, a | \rho | n, b \rangle \langle n, \beta | B | n, \alpha \rangle [U_{n,a\alpha}^* U_{n,b\beta}]_{U_n} \\ &= \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle n, a | \rho | n, b \rangle \langle n, \beta | B | n, \alpha \rangle V_{\Pi_1, \Pi_1} \delta_{a\alpha} \delta_{b\beta}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Hier gibt es nur eine Permutation, nämlich die Identität, bezeichnet durch Π_1 . In diesem Fall entspricht $\Pi_1^{-1} \Pi_1 = \Pi_1$ nur einem Zyklus der Länge $c_1 = 1$. Das

¹⁵Mittelwerte von diesem Typ wurden bereits, oft unabhängig voneinander, von unterschiedlichen Autoren [64, 65, 66, 67, 68, 69] analysiert. Wir beziehen uns auf [63], weil nur dort Fälle bis $n \leq 5$ behandelt werden, obwohl im Folgenden $n \leq 2$.

korrespondierende $V_{II_1} = V_1$ kann in den Tabellen II sowie IV in [63] gefunden werden (Spalte „CUE“, Reihe $n = 1$) und lautet $V_{II_1} = \frac{1}{d_n}$. Setzen wir dies in die obige Gleichung ein, so erhalten wir

$$\mu_t = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \frac{1}{d_n} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_n \} \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_n \} . \quad (4.29)$$

Unter Verweis auf (4.2) sowie (4.20) erhalten wir schließlich (4.8).

Herleitung von Gl. (4.9) und (4.10): Die Varianz in (4.9) kann umgeschrieben werden zu

$$\sigma_t^2 = \left[\text{Sp} \{ \rho_U B \}^2 \right]_U - \mu_t^2 . \quad (4.30)$$

Der zweite Term μ_t^2 auf der rechten Seite der obigen Gleichung folgt aus (4.29). Daher wenden wir uns dem ersten Term zu und finden, ähnlich wie in (4.24) sowie (4.26), dass

$$\left[\text{Sp} \{ \rho_U B \}^2 \right]_U = \left[\sum_{l,j} \sum_{\alpha,\beta,a,b} U_{l,a\alpha}^* U_{j,b\beta} \langle l, a | \rho | j, b \rangle \langle j, \beta | B | l, \alpha \rangle \cdot \sum_{m,n} \sum_{\gamma,\omega,c,d} U_{m,c\gamma}^* U_{n,d\omega} \langle m, c | \rho | n, d \rangle \langle n, \omega | B | m, \gamma \rangle \right]_U . \quad (4.31)$$

Für die Summationsindizes l, j, m, n definieren wir die Menge der Quadrupel

$$S := \{ (l, j, m, n) \mid l, j, m, n \in \{1, \dots, \mathcal{N}\} \} . \quad (4.32)$$

Wenn man sich jetzt an Gleichung (4.27) erinnert, erkennt man die Notwendigkeit drei Fälle zu betrachten, für welche der Erwartungswert in (4.31) nicht verschwindet. Diese entsprechen den Untermengen $S_1 : l = j \neq m = n$, $S_2 : l = j = m = n$ sowie $S_3 : l = n \neq m = j$ von S . Von nun an bezeichnen die S_i nicht nur die korrespondierenden Untermengen, sondern auch die entsprechenden Terme in (4.31). Daher erhalten wir

$$\left[\text{Sp} \{ \rho_U B \}^2 \right]_U = [S_1]_U + [S_2]_U + [S_3]_U . \quad (4.33)$$

Im ersten Fall, S_1 , zerfällt der Mittelwert in zwei Mittelwerte über die Eigenräume mit Indizes l und m . Damit gleicht die Berechnung der Herleitung von (4.8) und man erhält

$$\begin{aligned} [S_1]_U &= \sum_{l \neq m} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \langle l, a | \rho | l, b \rangle \langle l, \beta | B | l, \alpha \rangle [U_{l,a\alpha}^* U_{l,b\beta}]_{U_l} \\ &\quad \cdot \sum_{\gamma,\omega,c,d} \langle m, c | \rho | m, d \rangle \langle m, \omega | B | m, \gamma \rangle [U_{m,c\gamma}^* U_{m,d\omega}]_{U_m} \\ &= \sum_{l \neq m} \frac{1}{d_l} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \} \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l \} \frac{1}{d_m} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_m \} \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_m \} . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Im zweiten Fall, S_2 , entspricht der Mittelwert über die unitären Transformationen nicht mehr dem zuvor durchgeführten, sondern lautet:

$$[S_2]_U = \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} \sum_{\alpha, \beta, a, b} \langle l, a | \rho | l, b \rangle \langle l, \beta | B | l, \alpha \rangle \sum_{\gamma, \omega, c, d} \langle l, c | \rho | l, d \rangle \langle l, \omega | B | l, \gamma \rangle \cdot [U_{l, a\alpha}^* U_{l, b\beta} U_{l, c\gamma}^* U_{l, d\omega}]_{U_l} \quad (4.35)$$

Um diesen Ausdruck weiter auszuwerten machen wir erneut Gebrauch von (4.27) und finden

$$\begin{aligned} [U_{l, b\beta} U_{l, d\omega} U_{l, a\alpha}^* U_{l, c\gamma}^*]_{U_l} &= \underbrace{V_{\Pi_1, \Pi_1}}_{1/(d_l^2-1)} \delta_{ba} \delta_{dc} \delta_{\beta\alpha} \delta_{\omega\gamma} + \underbrace{V_{\Pi_1, \Pi_2}}_{-1/(d_l(d_l^2-1))} \delta_{ba} \delta_{dc} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\omega\alpha} \\ &+ \underbrace{V_{\Pi_2, \Pi_1}}_{-1/(d_l(d_l^2-1))} \delta_{bc} \delta_{da} \delta_{\beta\alpha} \delta_{\omega\gamma} + \underbrace{V_{\Pi_2, \Pi_2}}_{1/(d_l^2-1)} \delta_{bc} \delta_{da} \delta_{\beta\gamma} \delta_{\omega\alpha}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Hier entspricht Π_1 weiterhin der Identität, aber Π_2 bezeichnet die Permutation, welche die Zahlen 1 sowie 2 vertauscht. Dementsprechend ergeben sich für $\Pi_1^{-1} \Pi_1 = \Pi_2^{-1} \Pi_2 = \Pi_1$ zwei Zyklen der Längen $c_1 = c_2 = 1$, während $\Pi_2^{-1} \Pi_1 = \Pi_1^{-1} \Pi_2 = \Pi_2$ einen Zyklus der Länge $c_2 = 2$ ergibt. Die korrespondierenden $V_{\Pi_1, \Pi_1} = V_{\Pi_2, \Pi_2} = V_{1,1}$ und $V_{\Pi_2, \Pi_1} = V_{\Pi_1, \Pi_2} = V_2$ können wiederum in den Tabellen II sowie IV in [63] nachgeschlagen werden und haben die oben zitierten Werte. Setzen wir nun (4.36) in (4.35) ein und verwenden zudem $1/(d_l^2 - 1) = 1/d_l^2 + 1/(d_l^2(d_l^2 - 1))$, so erhalten wir

$$[S_2]_U = \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} \frac{1}{d_l^2} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \}^2 \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l \}^2 + S'_2, \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} S'_2 &:= \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} \left[\frac{1}{d_l^2(d_l^2-1)} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \}^2 \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l \}^2 \right. \\ &- \frac{1}{d_l(d_l^2-1)} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \}^2 \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l B \mathcal{P}_l \} \\ &- \frac{1}{d_l(d_l^2-1)} \sum_{a,b} |\langle l, a | \rho | l, b \rangle|^2 \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l \}^2 \\ &\left. + \frac{1}{d_l^2-1} \sum_{a,b} |\langle l, a | \rho | l, b \rangle|^2 \text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l B \mathcal{P}_l \} \right]. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Der erste Summand im obigen Ausdruck von $[S_2]_U$ kann, kombiniert mit dem ersten Fall $[S_1]_U$, genutzt werden, um den zweiten Teil der Varianz, μ_t^2 , zu eliminieren:

$$\sigma_t^2 = |[S_1]_U + [S_2]_U - \mu_t^2 + [S_3]_U| \leq |S'_2| + |[S_3]_U|. \quad (4.39)$$

Für die weitere Abschätzung der Varianz ist es hilfreich, dass ein hermitescher sowie nicht negativer Operator $\rho^{1/2}$ existiert, welcher $\rho^{1/2}\rho^{1/2} = \rho$ erfüllt (erinnere Kap. 2.1.1 oberhalb von (2.31)). Aufgrund dessen können wir die Cauchy-Schwarz Ungleichung in der folgenden Weise benutzen

$$\sum_{a,b} |\langle l, a | \rho | l, b \rangle|^2 \leq \sum_{a,b} \langle l, a | \rho | l, a \rangle \langle l, b | \rho | l, b \rangle = \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \}^2. \quad (4.40)$$

Ferner gebrauchen wir erneut die Invarianz der Varianz unter der Verschiebung $B \rightarrow B + \mathbb{1}_{\mathcal{H}} c$, wobei c eine beliebige reelle Zahl ist. Wir führen die Verschiebung so durch, dass B danach ein positiv definiter Operator ist. Schließlich erinnern wir uns an (2.42) und stellen fest, dass \mathcal{P}_l sowie $B\mathcal{P}_l B$ hermitesch sowie nicht negativ sind. Unter Anwendung all dessen finden wir die Schranke

$$|S'_2| \leq \sum_{l=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{\mathbf{p}_l^2 \|B\|^2 d_l^2}{d_l^2 (d_l^2 - 1)} + \frac{\mathbf{p}_l^2 \|B\|^2 (d_l + d_l^2)}{d_l (d_l^2 - 1)} + \frac{\mathbf{p}_l^2 \|B\|^2 d_l}{d_l^2 - 1} \right). \quad (4.41)$$

Für $d \geq 2$ und die korrekte Wahl von c , so dass $\|B\| \leq \Delta_B$, ergibt sich

$$|S'_2| \leq 4 (\Delta_B)^2 \max_n \left(\frac{\mathbf{p}_n}{d_n} \right). \quad (4.42)$$

Damit bleibt uns der dritte Fall, $[S_3]_U$, zur weiteren Auswertung

$$\begin{aligned} [S_3]_U &= \sum_{l \neq j} \sum_{\alpha, \beta, a, b} \langle l, a | \rho | j, b \rangle \langle j, \beta | B | l, \alpha \rangle \sum_{\gamma, \omega, c, d} \langle j, c | \rho | l, d \rangle \langle l, \omega | B | j, \gamma \rangle \\ &\quad \cdot [U_{j, b\beta} U_{l, d\omega} U_{l, a\alpha}^* U_{j, c\gamma}^*]_U. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Der Mittelwert über die unitären Transformationen lässt sich hier auf die Berechnung in (4.28) oder (4.34) zurückführen:

$$[U_{j, b\beta} U_{l, d\omega} U_{l, a\alpha}^* U_{j, c\gamma}^*]_U = [U_{j, b\beta} U_{j, c\gamma}^*]_{U_j} [U_{l, d\omega} U_{l, a\alpha}^*]_{U_l} = \frac{1}{d_j} \delta_{bc} \delta_{\beta\gamma} \frac{1}{d_l} \delta_{da} \delta_{\omega\alpha}, \quad (4.44)$$

was wiederum impliziert, dass

$$|[S_3]_U| = \left| \sum_{l \neq j} \sum_{\alpha, \beta, a, b} \frac{1}{d_l d_j} \langle l, a | \rho | j, b \rangle \langle j, \beta | B | l, \alpha \rangle \langle j, b | \rho | l, a \rangle \langle l, \alpha | B | j, \beta \rangle \right|. \quad (4.45)$$

Nun benutzen wir erneut die Cauchy-Schwarz Ungleichung aus (4.40) und erhalten

$$|[S_3]_U| \leq \sum_{l=j} \frac{1}{d_l d_j} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_l \} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_j \} |\text{Sp} \{ B \mathcal{P}_l B \mathcal{P}_j \}| \quad (4.46)$$

$$\leq \max_n \left(\frac{\mathbf{p}_n}{d_n} \right) \sum_j \frac{1}{d_j} \text{Sp} \{ \rho \mathcal{P}_j \} \text{Sp} \left\{ B \sum_l \mathcal{P}_l B \mathcal{P}_j \right\} \quad (4.47)$$

$$\leq \max_n \left(\frac{\mathbf{p}_n}{d_n} \right) (\Delta_B)^2. \quad (4.48)$$

Für (4.47) haben wir uns bewusst gemacht, dass $\text{Sp}\{B\mathcal{P}_l B\mathcal{P}_j\}$ nicht-negativ sein muss, da sowohl $B\mathcal{P}_l B$ als auch \mathcal{P}_j nicht-negative Operatoren sind. Zur Herleitung von (4.48) benutzen wir (2.42), $\|B^2\| = \|B\|^2$ und $\|B\| = \Delta_B$.

Mit Verweis auf (4.39) und unter Verwendung von (4.42) sowie (4.48) finden wir die folgende obere Schranke für die Varianz

$$\sigma_t^2 \leq 5 (\Delta_B)^2 \max_n \left(\frac{p_n}{d_n} \right). \quad (4.49)$$

Letztendlich bekommen wir, mit Blick auf (4.21), die angestrebten Gleichungen (4.9) sowie (4.10).

5 Rückblick und Ausblick

Nach der anfänglichen Klarstellung in der Einleitung, warum die Thermodynamik trotz ihres phänomenologischen Erfolgs keineswegs geradlinig aus der Quantenmechanik ableitbar ist, haben wir in Kap. 2.1 ein gutes Verständnis dafür entwickelt, weshalb man dennoch experimentell in generischen Vielteilchensystemen nach einer, wenn auch unbestimmten, Relaxationszeit praktisch keinen Unterschied mehr zwischen dem wahren Zustand und einem Gleichgewichtszustand feststellen kann. Dafür waren realistische Einschränkungen an die mathematischen Größen im Hilbertraum, mit welchen wir unsere quantenmechanischen Theorien formulieren, hinreichend. Leider mussten wir umgehend akzeptieren, dass dieses Equilibrium im Allgemeinen nicht zwingend dem der Thermodynamik entspricht. Zwar ist das der alltägliche Fall, aber mittlerweile gibt es im Labor Realisierungen von integrablen sowie MBL Systemen (vgl. Kap. 2.3.2), auf welche das nicht zutrifft.

Während unser Vorgehen zur Equilibration sehr rigoros und physikalisch wohl kontrolliert war, mussten wir für weitere Erkenntnisse über Relaxationsdynamik, Zeitskalen sowie Thermalisierung in Kap. 3 die Gangart ändern und haben das Konzept der Typikalität eingeführt. Damit haben wir dann einen analytischen Ausdruck der typischen Relaxationsdynamik für Systeme abgeleitet, welche equilibrieren und nicht zwingend thermalisieren (es sei denn die ETH gilt für sie). Obwohl wir in der Lage waren gewisse Experimente mittels dieser Dynamik zu beschreiben, ist die abgeleitete Zeitskala viel schneller als die der üblicherweise beobachteten Relaxationen (z.B. beim Abkühlen des Kaffees), die zudem in der Regel exponentiell verlaufen. Der Grund liegt in der Verletzung der gängigen Lokalitätsstruktur der physikalischen Größen beim Gebrauch der Typikalität.

Im dritten Abschnitt der Arbeit (Kap. 4) haben wir uns mit der Reproduzierbarkeit makroskopischer Phänomene trotz Unkenntnis sowie Unkontrollierbarkeit der mikroskopischen Details beschäftigt. Wir verstehen jetzt, dass das klassische Doppelpendel, welches kein Vielteilchensystem darstellt, das bessere Beispiel für Chaostheorie ist als der sehr wahrscheinlich nicht korrekte, aber populärere Schmetterlingseffekt. Der Schmetterling entspricht in diesem Kontext eben nur einem mikroskopischen Detail und das Wetter auf anderen Kontinenten ist dagegen nur von makroskopischen Parametern wie der Großwetterlage abhängig.

Neben der Herleitung alltäglicher und exponentiell langsamer Relaxationsdynamiken ist vor allem auch das noch unvollständige Verständnis der Thermalisierung ein weiterhin offenes Problem. Die Eigenstate Thermalization Hypothesis (für ETH siehe 2.3.1), mittels welcher das Gleichgewicht dem thermodynamischen entspricht, scheint nicht nur hinreichend, sondern gar notwendig für Thermalisierung [26, 27]. Eben diese ETH ist nach von Neumann auch bereits für die meisten aller Orientierungen der Basen von Observable und Hamiltonoperator innerhalb der Energieschale erfüllt. Warum die Observable zwar nicht mikroskopisch, aber makroskopisch von der Energie abhängt und weshalb die Basen nur auf den kleinen Bereichen einer Energieschale typisch orientiert sind, bleiben

aber berechnete Fragen. Vielleicht lassen sie sich im Rahmen des Ansatzes nach Deutsch [49] verstehen, wo der Hamiltonoperator nur mit einer schwachen Zufallsmatrix gestört wird. Derselbe Ansatz ist vielversprechend für die Herleitung alltäglicher Relaxationsdynamiken. Während Integrabilität in diesem Kontext instabil gegenüber Störungen ist, erscheint es merkwürdig, dass man dies für MBL nicht erwartet, eben weil MBL gerade selbst von Störungen lebt. Damit wäre die Abwesenheit von MBL im Alltag ungeklärt. Möglicherweise ist für ein abschließendes Verständnis der Thermalisierung sogar eine bessere Modellierung von Präparation sowie Messung des Systems in der Quantenmechanik vonnöten; beispielsweise eine dynamische Betrachtung des Messprozesses, die über den Standardformalismus hinausgeht.

Abseits der offenen Fragen in dem Feld selbst gibt es Querverbindungen zu unterschiedlichsten interessanten Problemstellungen: Praktische Bedeutung hat die Abhängigkeit unserer Resultate von den Freiheitsgraden für mesoskopische Systeme mit deutlich weniger Teilchen als der Avogadro-Konstanten. Hier können sie helfen zu verstehen bis zu welchem Regime die (Quanten)Thermodynamik noch anwendbar ist. Weiterhin mag es mehr als reiner Zufall sein, dass die Zeit, nach der Schwerionenkollisionen am CERN oder RHIC sich durch Hydrodynamik, welche ja auf thermischen Annahmen basiert, beschreiben lassen [70], gerade mit der wahnsinnig schnellen Boltzmannzeitskala aus (3.9) übereinstimmt. Darüber hinaus wird auch eine Relevanz für die Phase des Reheating im frühen Universum diskutiert [71]. Im gleichen Kontext befindet sich die Frage nach der Entwicklung des Universums und dem damit assoziierten Zeitpfeil [72], welcher im Kontrast zur Zeitumkehrinvarianz der mikroskopischen Dynamik steht. Die Thematik der sogenannten Boltzmann Brains beschäftigt sich mit der Tatsache, dass die heutige Konfiguration des Universums inklusive des komplexen Lebens darin einem entropisch wahnsinnig unwahrscheinlichen Zustand entspricht [73]. Hervorzuheben ist, dass der Teil der Typikalitätsmethoden, der durch [36, 37] eigenständig wiederentdeckt wurde (siehe Kap. 3.1), zuerst in der Thermodynamik Schwarzer Löcher Anwendung fand [74]. Noch fundamentaler, aber auch spekulativer sind die Ideen der emergenten oder auch entropischen Gravitation, die auf Konzepten der statistischen Quantenmechanik aufbauen [75, 76].

Philosophisch amüsant erscheint dem Autor, dass aufgrund des quantenmechanischen Wiederkehrtheorems das kosmologische Szenario des Big Bounce dem des Big Rip überlegen wirkt. In dem Sinne: Auf Wiedersehen!

Danksagung

In erster Linie möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Peter Reimann für seine intensive Betreuung danken. Er hatte stets ein offenes Ohr für Rückfragen und ist diesen immer auf Augenhöhe begegnet. Ich bin froh bei einem derart unprätentiösen, aber gleichzeitig physikalisch scharfsinnigen Professor promovieren zu dürfen. Darüber hinaus danke ich Prof. Dr. Michael Kastner (Stellenbosch, Südafrika) für die Diskussionen, welche zur Entwicklung von Kap. 2.2 beigetragen haben. Der gesamten Arbeitsgruppe der Theorie der kondensierten Materie danke ich für die herzliche Aufnahme in ebendiese und die nette gemeinsame Zeit. Hierbei danke ich insbesondere Prof. Dr. Jürgen Schnack für die interessanten Diskussionen sowie hochschulpolitischen Einblicke während diverser Mensaeßen. Ohne meinen Kommilitonen Patric Hölscher hätte ich mein Studium nicht so gut gemeistert; ihm verdanke ich viel anregenden Gedankenaustausch. Familie und Freunden, insbesondere meiner Frau Linda, bin ich zu Dank für die Unterstützung bei zahlreichen Stimmungsschwankungen im Verlauf des Erkenntnisprozesses verpflichtet. Last but not least, danke ich meinem Vater Eckart Balz und meinem Nachfolger Lennart Dabelow für das gründliche Korrekturlesen dieser Arbeit. Letzterem wünsche ich eine ebenso bereichernde Promotionsphase, wie ich sie erleben durfte.

Für die finanzielle Unterstützung der Promotion danke ich sowohl der Deutschen Forschungsgemeinschaft (RE1344/7-1) wie auch der Studienstiftung des deutschen Volkes. Letztere hat meine Promotion mit ihrer zusätzlichen ideellen Förderungen um viele Blicke über den Tellerrand bereichert. Bei der Heraeus Stiftung bedanke ich mich für die Reisekostenzuschüsse zu den Frühjahrstagungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Regensburg (2016), Dresden (2017) sowie Berlin (2018). Auch bei der STATPHYS 26 Konferenz in Lyon (2016) und der EU-COST Quantum Thermodynamics Konferenz in Oxford (2017) wurden mein Einblick in das Forschungsfeld sowie die Präsentation meiner Resultate durch Tagungsstipendien großzügig gefördert.

Literatur

- [1] ed. by P. A. Schilpp, *Albert Einstein: philosopher scientist*, Open Court Publ. (1970)
- [2] J.J. Loschmidt, *Über den Zustand des Wärmegleichgewichtes eines Systems von Körpern mit Rücksicht auf die Schwerkraft*, Sitzungsber. Kais. Akad. Wiss., Math. Naturwiss. Classe, II. Abteilung **73**, 128 (1876)
- [3] L. Sklar, *Physics and chance. Philosophical issues in the foundations of statistical physics*, Cambridge University Press (1993)
- [4] P. Reimann and M. Evstigneev, *Quantum versus classical foundation of statistical mechanics under experimentally realistic conditions*, Phys. Rev. E **88**, 052114 (2013)
- [5] L. Boltzmann, *Zu Hr. Zermelo's Abhandlung „Ueber die mechanische Erklärung irreversibler Vorgänge“*, Annalen der Physik, Band 296 Heft 2
- [6] J. von Neumann, *Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik*, Z. Phys. **57**, 30 (1929)
- [7] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghi, *Long-time behaviour of macroscopic quantum systems: commentary accompanying the English translation of John von Neumann's 1929 article on the ergodic theorem*, Eur. Phys. J. H **35**, 173 (2010)
- [8] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, C. Mastrodonato, R. Tumulka, and N. Zanghi, *Approach to thermal equilibrium of macroscopic quantum systems*, Phys. Rev. E **81**, 011109 (2010)
- [9] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, C. Mastrodonato, R. Tumulka, and N. Zanghi, *Normal typicality and von Neumann's quantum ergodic theorem*, Proc. R. Soc. A **466**, 3203 (2010)
- [10] B. N. Balz and P. Reimann, *Equilibration of isolated many-body quantum systems with respect to general distinguishability measures*, Phys. Rev. E **93**, 062107 (2016)
- [11] B. N. Balz and P. Reimann, *Typical relaxation of isolated many-body systems which do not thermalize*, Phys. Rev. Lett. **118**, 190601 (2017)
- [12] C. Bartsch and J. Gemmer, *Dynamical typicality of quantum expectation values*, Phys. Rev. Lett. **102**, 110403 (2009)
- [13] B. N. Balz, J. Richter, J. Gemmer, R. Steinigeweg, and P. Reimann, *Dynamical Typicality for initial states with a preset measurement statistics of several commuting observables*, book chapter in 'Thermodynamics in the quantum regime - Recent Progress and Outlook' Springer (2018), (to be published)

- [14] P. Reimann, *Foundation of statistical mechanics under experimentally realistic conditions*, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008)
- [15] A. J. Short, *Equilibration of quantum systems and subsystems*, New J. Phys. **13**, 053009 (2011)
- [16] A. J. Short and T. C. Farrelly, *Quantum equilibration in finite time*, New J. Phys. **14**, 013063 (2012)
- [17] P. Reimann and M. Kastner, *Equilibration of isolated macroscopic quantum systems*, New J. Phys. **14**, 043020 (2012)
- [18] P. Reimann, *Equilibration of isolated macroscopic quantum systems under experimentally realistic conditions*, Phys. Scr. **86**, 058512 (2012)
- [19] D. Hetterich, M. Fuchs and B. Trauzettel, *Equilibration in closed quantum systems: Application to spin qubits*, Phys. Rev. B **92**, 155314 (2015)
- [20] L. P. Garcia-Pintos, N. Linden, A. S. Malabarba, A. J. Short, and A. Winter, *Equilibration Time Scales of Physically Relevant Observables*, Phys. Rev. X **7**, 031027 (2017)
- [21] M. Schlosshauer, *Decoherence and the quantum to classical transition* in Springer: The Frontiers Collection (2007)
- [22] J. Preskill, Lecture Notes for Quantum Information at CalTech (2015), www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph219/chap3_15.pdf (22.05.2018)
- [23] A. Peres and W. K. Wootters, *Optimal Detection of Quantum Information*, Phys. Rev. Lett. **66**, 1119 (1991)
- [24] S. Massar and S. Popescu, *Optimal Extraction of Information from Finite Quantum Ensembles*, Phys. Rev. Lett. **74**, 1260 (1995)
- [25] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, Springer, 3.Auflage (2006)
- [26] P. Reimann, *Dynamical typicality approach to eigenstate thermalization*, Phys. Rev. Lett. **120**, 230601 (2018)
- [27] C. Bartsch and J. Gemmer, *Necessity of eigenstate thermalisation for equilibration towards unique expectation values when starting from generic initial states*, EPL **118** (2017)
- [28] C. Gogolin and J. Eisert, *Equilibration, Thermalisation, and the emergence of statistical mechanics in closed quantum systems*, Rep. Prog. Phys. **79**, 056001 (2016)
- [29] N. Shiraishi and T. Mori, *Systematic Construction of Counterexamples to the Eigenstate Thermalization Hypothesis*, Phys. Rev. Lett. **119**, 030601 (2017)

- [30] R. Mondaini, K. Mallayya, L. F. Santos, and M. Rigol, *Comment on "Systematic Construction of Counterexamples to the Eigenstate Thermalization Hypothesis"*, arXiv:1711.06279
- [31] N. Shiraishi and T. Mori, *Reply to "Comment on "Systematic Construction of Counterexamples to the Eigenstate Thermalization Hypothesis" by Mondaini et.al"*, arXiv:1712.01999
- [32] M. Rigol, V. Dunjko, and M Olshanii, *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*, Nature **452**, 854 (2008)
- [33] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and G. Mussardo, *Introduction to 'Quantum Integrability in Out of Equilibrium Systems'*, J. Stat. Mech. 064001 (2016)
- [34] R. Nandkishore and D. A. Huse, *Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics*, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **6**, 15 (2015)
- [35] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider, and I. Bloch, *Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice*, Science **349**, 842 (2016)
- [36] S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, *Entanglement and the foundations of statistical mechanics*, Nature Physics **2**, 754 (2006)
- [37] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N Zanghi, *Canonical Typicality*, Phys. Rev. Lett. **96**, 050403 (2006)
- [38] P. Reimann, *Typicality for generalized microcanonical ensembles*, Phys. Rev. Lett. **99**, 160404 (2007)
- [39] P. Reimann, *Generalization of von Neumann's approach to thermalization*, Phys. Rev. Lett. **115**, 010403 (2015)
- [40] P. Reimann, *Typical fast thermalization processes in closed many-body systems*, Nature Communications **7**, 10821 (2016)
- [41] R. Hamazaki and M. Ueda, *Atypicality of Most Few-Body Observables*, Phys. Rev. Lett. **120**, 080603 (2018)
- [42] J. Smith, A. Lee, P. Richerme, B. Neyenhuis, P.W. Hess, P. Hauke, M. Heyl, D. A. Huse, and C. Monroe, *Many-body localization in a quantum simulator with programmable random disorder*, Nat. Phys. **12**, 907 (2016)
- [43] Y.-L. Wu and S. Das Sarma, *Understanding analog quantum simulation dynamics in coupled ion-trap qubits*, Phys. Rev. A **93**, 022332 (2016)
- [44] M. Kuhnert, R. Geiger, T. Langen, M. Gring, B. Rauer, T. Kitagawa, E. Demler, D. Adu Smith, and J. Schmiedmayer, *Multimode Dynamics and Emergence of a Characteristic Length Scale in a One-Dimensional Quantum System*, Phys. Rev. Lett. **110**, 090405 (2013).

- [45] M. Gring, M. Kuhnert, T. Langen, T. Kitagawa, B. Rauer, M. Schreitl, I. Mazets, D. Adu Smith, E. Demler, and J. Schmiedmayer, *Relaxation and prethermalization in an isolated quantum system*, Science **337**, 1318 (2012)
- [46] B. Rauer, T. Schweigler, T. Langen, and J. Schmiedmayer, in *Quantum Matter at Ultralow Temperatures*, Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi,” Course CXCI, edited by M. Inguscio, W. Ketterle, S. Stringari, and G. Roati (IOS Press, Amsterdam, 2016), p. 485
- [47] M. Rigol, *Breakdown of Thermalization in Finite One-Dimensional Systems*, Phys. Rev. Lett. **103**, 100403 (2009)
- [48] E. J. Torres-Herrera, M. Vyas, and L. F. Santos, *General features of the relaxation dynamics of interacting quantum systems*, New J. Phys. **16**, 063010 (2014)
- [49] P. Reimann, *Eigenstate thermalization: Deutsch’s approach and beyond*, New J. Phys. **17**, 055025 (2015)
- [50] T. R. de Oliveira, C. Charalambous, D. Jonathan, M. Lewenstein and A. Riera, *Equilibration time scales in closed many-body quantum systems*, New J. Phys. **20**, 033032 (2018)
- [51] P. Reimann, *Canonical Thermalization*, New J. Phys. **12**, 055027 (2010)
- [52] M. P. Müller, D. Gross, and J. Eisert, *Concentration of Measure for Quantum States with a Fixed Expectation Value*, Commun. Math. Phys. **303**, 785 (2011)
- [53] B. V. Fine, *Typical state of an isolated quantum system with fixed energy and unrestricted participation of eigenstates*, Phys. Rev. E **80**, 051130 (2009)
- [54] S. Sugiura and A. Shimizu, *Thermal Pure Quantum States at Finite Temperature*, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012)
- [55] S. Goldstein, D. A. Huse, J. L. Lebowitz, and R. Tumulka, *Thermal Equilibrium of a Macroscopic Quantum System in a Pure State*, Phys. Rev. Lett. **115**, 100402 (2015)
- [56] H. Tasaki, *Typicality of Thermal Equilibrium and Thermalization in Isolated Macroscopic Quantum Systems*, J. Stat. Phys. **163**, 937 (2016)
- [57] H. Lin, In: Fillmore, P.A., Mingo, J.A. (eds.) *Operator Algebras and their Applications* (Fields Institute Communications 13), pp. 193–233. American Mathematical Society (1997)
- [58] K. R. Davidson, *Almost Commuting Hermitian Matrices*, Math. Scand. **56**, 222 (1985)

- [59] M. B. Hastings, *Making Almost Commuting Matrices Commute*, Commun. Math. Phys. **291**, 321 (2009)
- [60] Y. Ogata, *Approximating macroscopic observables in quantum spin systems with commuting matrices*, J. Funct. Anal. **264**, 2005 (2013)
- [61] David Poulin, Angie Qarry, Rolando Somma, and Frank Verstraete, *Quantum Simulation of Time-Dependent Hamiltonians and the Convenient Illusion of Hilbert Space*, Phys. Rev. Lett. **106**, 170501 (2011)
- [62] M. Kliesch, T. Barthel, C. Gogolin, M. Kastoryano, and J. Eisert, *Dissipative Quantum Church-Turing Theorem*, Phys. Rev. Lett. **107**, 120501 (2011)
- [63] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker, *Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems*, J. Math. Phys. **37**, 4904 (1996)
- [64] I. E. Farquhar and P. T. Landsberg, *On the quantum-statistical ergodic and H-theorems*, Proc. Royal Soc. London **239**, 134 (1957)
- [65] P. Bocchieri and A. Loinger, *Ergodic Theorem in Quantum Mechanics*, Phys. Rev. **111**, 668 (1958)
- [66] P. Bocchieri and A. Loinger, *Ergodic Foundation of Quantum Statistical Mechanics*, Phys. Rev. **114**, 948 (1959)
- [67] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, and S. S. M. Wong, *Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations*, Rev. Mod. Phys. **53**, 385 (1981), Sect. VIII.B.
- [68] P. Pechukas, *Sharpening an inequality in quantum ergodic theory*, J. Math. Phys. **25**, 532 (1984)
- [69] J. Gemmer, M. Michel, and G. Mahler, *Quantum Thermodynamics* (2nd edition, Springer, Berlin, Heidelberg, 2009), Appendix A
- [70] J. Berges, Sz. Borsányi, and C. Wetterich, *Prethermalization*, Phys. Rev. Lett. **93**, 142002 (2004)
- [71] T. Langen, T. Gasenzer, and J. Schmiedmayer, *Prethermalization and universal dynamics in near-integrable quantum systems*, J. Stat. Mech. 064009 (2016)
- [72] S. Goldstein, R. Tumulka, and N. Zanghì, *Is the hypothesis about a low entropy initial state of the Universe necessary for explaining the arrow of time?*, Phys. Rev. D **94**, 023520 (2016)
- [73] S. Carroll, Boltzmann’s Anthropic Brain (01.08.2006), <http://www.preposterousuniverse.com/blog/2006/08/01/boltzmanns-anthropic-brain/>

- [74] S. Lloyd, *Pure state quantum statistical mechanics and black holes*, Ph.D. Thesis, The Rockefeller University (1988), Chapter 3, arXiv:1307.0378
- [75] E. P. Verlinde, *Emergent Gravity and the Dark Universe*, SciPost Phys. **2**, 016 (2017)
- [76] D. Sels and M. Wouters, *Quantum statistical gravity: time dilation due to local information in many-body quantum systems*, J. Phys.: Conf. Ser. **880**, 012047 (2017)