

ARBEID ONTTREKKEN UIT VERALGEMEENDE  
GIBBS-ENSEMBLES DOOR MIDDEL VAN  
BRAGG-SPECTROSCOPIE

WOUTER VERSTRAELEN  
PROMOTOR: PROF. DR. MICHIEL WOUTERS



Proefschrift ter verkrijging van de graad van Master in de Fysica

Departement Fysica  
Faculteit Wetenschappen  
Universiteit Antwerpen

Academiejaar 2015-2016

Wouter Verstraelen: *Arbeid onttrekken uit veralgemeende Gibbs-ensembles door middel van Bragg-spectroscopie*, Proefschrift ter verkrijging van de graad van Master in de Fysica, Academiejaar 2015-2016

## ABSTRACT

---

In this thesis, we establish a concrete connection between the historical foundations of thermodynamics and modern quantum statistical mechanics. Whereas a broad class of macroscopic many-body systems will always relax to thermal equilibrium, the picture is different for integrable quantum systems. While eigenstate thermalization may fulfill the correspondence principle for typical macroscopic systems that are non-integrable, integrable quantum systems have an extensive number of expectation values that are conserved. These conserved quantities prevent the system to reach the familiar Boltzmann-Gibbs state.

By a recent conjecture by M. Rigol et al. such integrable quantum systems can be described appropriately by a *Generalized Gibbs Ensemble (GGE)*, introduced by E.T. Jaynes in 1957. The GGE captures a lagrange multiplier for every single conserved quantity, whereas in thermal systems only energy is conserved. In our study of a fermionic chain, we treat all occupation numbers as conserved quantities, and lose information about off-diagonal elements of the single-particle density matrix by decoherence through time-averaging.

In this thesis, we show how such a chain can be prepared out-of-equilibrium by quenching with an additional periodic potential. Furthermore, we demonstrate how work can be extracted from this system by a permutation of the energy levels. We present and compare two separate protocols for decomposing this permutation in two-level transpositions. In addition, we show how each transposition can be realized by Bragg spectroscopy that modifies the *external* degrees of freedom of the particles.

Two different cases are assumed as a dispersion relation: a free fermion gas and a tight-binding lattice. In the latter case the periodicity of k-space forces us to choose a Brillouinzone and we will show the benefits of dynamically varying the edges of this Brillouinzone.

The processes are simulated in Mathematica, where only algebraic operations, as opposed to operations from calculus, had to be performed numerically. In all cases the extracted work has been analyzed as a function of the speed of the operations, leading to an extraction that approaches its maximum in the adiabatic limit. This maximal extracted limit always coincides with the theoretically maximal amount of work extractable from the system in the case of the free gas and these amounts are also coinciding in the case of the tight-binding lattice provided appropriate conditions are met.



## VULGARISERENDE SAMENVATTING

---

De macroscopische klassieke systemen die gewoonlijk in de thermodynamica bestudeerd worden, zullen steeds naar een evenwichtstoestand (Boltzmann-Gibbs ensemble) evolueren met één enkele temperatuur (thermaliseren). Dit is mogelijk doordat deze systemen, zoals een ideaal gas, microscopisch voldoende chaotisch zijn, en enkel de totale energie een behouden grootheid vormt. Volgens de kwantummechanica is er echter een veel groter aantal grootheden behouden, een aantal dat exponentieel stijgt in de systeemgrootte. Voor kwantumsystemen die voldoen aan de zogenaamde ‘eigentoestandsthermalisatiehypothese’ zijn de behouden grootheden van een speciale vorm waardoor toch thermalisatie optreedt. Zogeheten ‘integreerbare’ systemen daarentegen blijven een effect hebben van meerdere behouden grootheden, zullen niet volledig thermaliseren en kunnen worden beschreven met een ‘veralgemeend Gibbs-ensemble’. Zulk veralgemeend Gibbs-ensemble bevat verschillende deeltjesaantallen bij verschillende duidelijk onderscheidbare toestanden. Een gevolg is dat integreerbare systemen een ‘batterij’ vormen, waaruit nog arbeid valt te onttrekken. Dit in tegenstelling tot de gebruikelijke thermodynamische onderwerpen zoals de Carnot-cyclus die een extern warmte- en koudebad vergen om arbeid te produceren.

In deze thesis wordt een specifiek voorbeeld van een integreerbaar systeem bestudeerd: een keten fermionische deeltjes die uit evenwicht gebracht wordt door ‘quenching’.

In deze thesis wordt eerst en vooral deze quenching als dusdanig bestudeerd en vervolgens wordt aangetoond hoe uit dit systeem arbeid kan onttrokken worden via ‘Bragg-spectroscopie’ waarbij met interfererende lasers de bezettingen van twee toestanden kunnen worden omgewisseld. We ontwikkelen en vergelijken twee protocollen om het systeem in de laagste-energietoestand te krijgen, zodat er een maximale hoeveelheid arbeid vrijkomt, en analyseren de resultaten als functie van de snelheid waarmee de Bragg-operaties gebeuren.

Op deze manier draagt dit werk bij tot het verbinden van enkele verschillende deelgebieden in de fysica, met name de kwantummechanica, de statistische mechanica en de thermodynamica.



## DANKWOORD

---

Bij deze zou ik nog enkelen willen bedanken die van groot belang zijn geweest bij de totstandkoming van deze thesis. Eerst en vooral is er natuurlijk mijn promotor. Het is prof. Michiel Wouters die mijn fascinatie kon wekken voor de open vragen in kwantum-statistische mechanica en me dit thesisonderwerp heeft aangereikt. Ik heb, los van de nodige en –naar mijn perceptie- zeer degelijke bijsturing, ook nooit het gevoel gekregen zelf geen vrijheid meer te krijgen. Daarnaast is er Dries Sels die, samen met prof. Wouters, een groot deel van het voorbereidende werk heeft gedaan en me ook tijdens het jaar enkele keren heeft verder geholpen. Ik zou ook de volledige groep TQC willen bedanken voor hun gastvrijheid en me te overtuigen van het plezier van wetenschap. De leden hebben mij ook enkele keren snelle oplossingen geboden voor een aantal praktische Mathematica- en andere problemen. Toch zou ik ook nog de stackexchange-community van Mathematica willen vermelden, een programma waarin ik een jaar geleden nog een absolute beginner was.

Vervolgens zijn er mijn studiegenoten in hetzelfde schuitje waarmee ik kon bijpraten, net als alle anderen die me bij deze thesis hebben gesteund.

Bij uitbreiding zou ik mijn medestudenten ook willen bedanken voor de voorbije vijf jaar evenals alle profs en assistenten van de opleiding Fysica. Tot slot zou ik specifiek nog mijn ouders en grootouders willen bedanken voor hun steun doorheen mijn hele studieloopbaan.





# INHOUDSOPGAVE

---

<b>I</b>	<b>ACHTERGROND</b>	<b>1</b>
1	INLEIDING	3
2	FUNDAMENTEN VAN THERMODYNAMICA	5
2.1	Inleiding Thermodynamica . . . . .	5
2.2	Formalisatie . . . . .	6
2.2.1	Thermodynamische begrippen . . . . .	6
2.2.2	Hoofdwetten van de Thermodynamica . . . . .	7
3	HET VERALGEMEENDE GIBBS-ENSEMBLE	11
3.1	Statistische fysica en ensembles . . . . .	11
3.1.1	Statistische beschrijving van de natuur . . . . .	11
3.1.2	Het begrip ‘ensemble’ . . . . .	12
3.1.3	Ergodiciteit en Thermalisatie . . . . .	14
3.1.4	Het Boltzmann-Gibbs ensemble . . . . .	17
3.2	Het veralgemeende Gibbs-ensemble . . . . .	18
3.2.1	Optimalisatie van het GGE . . . . .	21
3.3	Belang van GGE’s . . . . .	21
4	THERMODYNAMICA VAN GESLOTEN KWANTUMSYSTEMEN	23
4.1	Arbeid onttrekken uit gesloten kwantumsystemen . . . . .	23
4.2	Majorisatie in de thermodynamica . . . . .	26
4.3	Overige state-of-the-art . . . . .	26
5	BRAGG-SPECTROSCOPIE	29
5.1	Een optisch rooster . . . . .	29
5.2	Bragg-spectroscopie . . . . .	30
5.3	Toepassingen . . . . .	32
<b>II</b>	<b>METHODE</b>	<b>33</b>
6	SET-UP	35
6.1	Set-up . . . . .	35
6.2	GGE van het systeem . . . . .	36
7	AANPAK	39
7.1	Tweeniveau-verwisseling . . . . .	39
7.2	Permutatie-ontbinding . . . . .	42
8	IMPLEMENTATIE	45
8.1	Vrij Fermiongas . . . . .	45
8.1.1	Heisenbergvergelijkingen . . . . .	45
8.1.2	Veralgemeend Gibbs-ensemble . . . . .	46
8.2	Tight-Bindinggeval . . . . .	47
8.2.1	Samenvallende resonanties . . . . .	48
8.3	Computationele uitwerking . . . . .	49
8.3.1	De functie wissel . . . . .	51
8.3.2	De functie shiftedwissel . . . . .	51

8.3.3	De functies $\text{toTranspositions1}$ en $\text{toTranspositions2}$	52
8.3.4	De functie $\text{orderingToTarget}$	52
8.3.5	De functies $\text{sorteringper}$ / $\text{sorteringaper}$	52
9	QUENCHING	55
9.1	Tijdsevolutie en Kwantumquenches	55
9.2	Quenching van een fermionische keten	56
9.3	Computationale uitwerking van de quenches	56
9.3.1	Voorwaartse quench in $k$ -ruimte	58
9.3.2	Voorwaartse quench in $x$ -ruimte	59
9.3.3	Achterwaardse quench in $k$ -ruimte	59
9.3.4	Achterwaardse quench in $x$ -ruimte	59
III	RESULTATEN EN DISCUSSIE	61
10	RESULTATEN VAN DE QUENCH	63
10.1	Voorwaartse quench	63
10.2	Achterwaardse quench	66
11	VRIJ FERMIONENGAS	71
11.1	Vanuit gequenchte toestand	71
11.2	Analytische afleiding van het gedrag	72
12	TIGHT-BINDINGMODEL	75
12.1	Onverstoord	76
12.2	Met Galilei-verschoven basistoestanden	78
12.3	Met Next-Nearest-Neighbourkoppeling	79
12.3.1	$\sigma/\tau = 0.01$	79
12.3.2	$\sigma/\tau = 0.1$	81
13	CONCLUSIE	83
	BIBLIOGRAFIE	85

Deel I

ACHTERGROND



## INLEIDING

---

In deze thesis worden oude thermodynamische vragen herbekeken vanuit een modern kwantumstatistisch perspectief. Hiertoe moeten enkele concepten en resultaten uit verschillende deelgebieden van de fysica gecombineerd worden.

De vraag die deze thesis tracht te beantwoorden is: “Kan er arbeid onttrokken worden uit een Veralgemeend Gibbs-ensemble door gebruik makend van Bragg-spectroscopie?”, en vervolgens “Waarvan is deze hoeveelheid arbeid afhankelijk? Met welke entropietoename gaat dit gepaard?” Omdat voor deze thesis veel losse invalshoeken moeten worden gecombineerd, werd gekozen voor een structuur met relatief korte hoofdstukken, die de tekst hopelijk ook vlot leesbaar maakt.

In de volgende hoofdstukken van deel I zullen de voornaamste nodige concepten in detail besproken worden. In [hoofdstuk 2](#) wordt het idee van arbeid onttrekken besproken ingeleid vertrekkende uit de context van 19de eeuwse thermodynamica, dewelke de praktische opzet had de stoommachines te verbeteren en daarmee ook aan de wieg lag van de tweede hoofdwet.

Het volgende hoofdstuk, [hoofdstuk 3](#), herhaalt enkele basisideeën uit de statistische mechanica. Vanuit de visie van E.T. Jaynes wordt het veralgemeend Gibbs-ensemble (GGE) geïntroduceerd, dat een centrale rol heeft in deze thesis. Het gaat hier om een specifieke klasse van verdelingsfuncties van toestanden van het systeem die de laatste jaren veel aandacht heeft gekregen in de studie van zogeheten integreerbare kwantumsystemen.

Hierna wordt in [hoofdstuk 4](#) opnieuw thermodynamica bestudeerd, ditmaal ietwat technischer en dieper ingaand op de huidige kennis van het arbeid onttrekken in generieke, voornamelijk gesloten, kwantumsystemen.

Vervolgens is [hoofdstuk 5](#) gewijd aan Bragg-spectroscopie. Met deze techniek, regelmatig gebruikt voor de studie van koude gassen, kunnen de externe vrijheidsgraden van een deeltje worden veranderd aan de hand van interfererend laserlicht dat als optische potentiaal fungeert. We zullen dit onderwerp vooral abstract bespreken, zonder al te diep in te gaan op de praktische opstellingen.

In deel II wordt de kennis uit deel I gebruikt om een specifieke opstelling voor te stellen en wordt uiteengezet hoe de onderzoeksvraag beantwoord kan worden. In [hoofdstuk 6](#) wordt de praktische set-up behorende bij een lineaire fermionische keten uit de doeken gedaan

en hoe deze kan worden voorgesteld door een GGE. In [hoofdstuk 7](#) wordt de arbeidsonttrekking bestudeerd voor twee niveaus en worden twee protocollen opgesteld om de connectie te maken met systemen die meer niveaus bevatten. In [hoofdstuk 8](#) worden deze zaken samengebracht, enkele mogelijke problemen overlopen en tot slot de numerieke implementatie gegeven. In het laatste hoofdstuk van dit deel, [hoofdstuk 9](#) wordt dieper ingegaan op quantum quenching en hoe deze techniek aangewend kan worden om een metastabiele begintoestand te bekomen.

Deel III is ten slotte gewijd aan de bekomen resultaten met een woordje discussie. Eerst worden in [hoofdstuk 11](#) de onttrokken arbeid voor een vrij gas geanalyseerd. In [hoofdstuk 10](#) wordt specifiek gekeken naar de toestanden die door quenching worden bekomen. De onttrokken arbeid uit een tight-bindinghamiltoniaan wordt weer gegeven in [hoofdstuk 12](#). De thesis wordt afgesloten met [hoofdstuk 13](#) dat de conclusies samenvat en waar enkele suggesties voor verder onderzoek worden gegeven.

## 2.1 INLEIDING THERMODYNAMICA

Aan de thermodynamica zoals we die nu kennen gaat een geschiedenis vooraf met eeuwenoude wortels. Toch duurde het vanaf dan nog eeuwen tot het huidige coherente formalisme werd opgesteld [28]. De term *temperatuur* is bijvoorbeeld ontstaan uit de geneeskundige pseudowetenschap van Hippokrates (460-370 v.C.) en Galenos (133-200 n.C.), die met deze term verwijzen naar mengelingen en dan in het bijzonder naar mengelingen van warm en koud, met de middelmaat het ideale.

Centraal voor de ontwikkeling van de thermodynamica uit de nieuwe tijd stond de stoommachine. Dennis Papin (1647-1712) kon een gewicht opheffen door het condenseren van water. De opstellingen van Papin werkten echter niet cyclisch: er kon maar een enkele hoeveelheid arbeid worden verricht per keer. Dit in tegenstelling tot de stoommachines ontwikkeld door Savery (1650-1715) en Newcomen (1663-1723) die wel cyclisch werkten en toepassingen vonden in de mijnbouw. James Watt (1736-1819) slaagde erin een roterende beweging te creëren. Het praktijkwerk van deze ingenieurs vormde (letterlijk en figuurlijk) de motor achter de industriële revolutie, terwijl deze personen weinig belangstelling hadden voor de theoretische achtergrond bij deze systemen. De fysicus Sadi Carnot (1796-1832) toonde via gedachteexperimenten aan dat er een bovengrens was aan het rendement dat stoommachines konden bereiken. Clapeyron (1799-1864) bedacht onder meer de grafische representatie in  $(p, V)$ -diagrammen. Lord Kelvin (1824-1907), geboren als W. Thomson, gaf zijn naam aan de eenheid van temperatuur en stelde de tweede hoofdwet voor als een continue degradatie van energie in warmte. Clausius (1822-1888) was de eerste om het macroscopische begrip 'entropie' in te voeren. Hij bedacht ook de eerste hoofdwet zoals we die nu kennen, waar warmte en arbeid twee vormen van een begrip 'energie' zijn die in elkaar kunnen worden omgezet. Hiermee bouwde hij voort op eerder werk van onder meer Mayer (1814-1878), Joule (1818-1889) en Helmholtz (1821-1894).

Parallel aan deze macroscopische thermodynamica werden ook microscopische theorieën ontwikkeld, maar het verband tussen deze kinetiek en de thermodynamica werd niet als belangrijk beschouwd tot het werk van Maxwell (1831-1879) en Boltzmann (1844-1906). Op deze statistische mechanica wordt teruggekomen in [hoofdstuk 3](#) en de rest van dit hoofdstuk is gewijd aan de macroscopische thermodynamica.

## 2.2 FORMALISATIE

In deze sectie wordt de structuur van de huidige macroscopische thermodynamica kort samengevat. Deze wetten zijn breed aanvaard [18] en kennen vele praktische toepassingen. Tenzij anders aangegeven, kunnen alle systemen als macroscopisch worden beschouwd en zijn de toestanden waarvan sprake macrotoestanden.

### 2.2.1 Thermodynamische begrippen

- Een *thermodynamische toestand* of *macrotoestand* is een macroscopische toestand bepaald door de gepaste thermodynamische parameters.
- Als een thermodynamische toestand stationair is, noemt men het systeem in *thermodynamisch evenwicht*. Als twee systemen met elkaar in evenwicht zijn wil dit zeggen dat ze kunnen beschouwd worden als twee verbonden subsystemen van een groter systeem en dit samengestelde systeem is in evenwicht.
- Een *thermodynamisch proces* verandert de toestand van het systeem door externe invloeden. Een proces is *cyclisch met periode T* als alle externe factoren op  $t = 0$  gelijk zijn als op  $t = T$ .
- Het begrip *arbeid* wordt overgenomen uit de mechanica, waar het gedefinieerd wordt als

$$dW = \vec{F}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (2.1)$$

Dit begrip treedt in de thermodynamica bijvoorbeeld op bij het infinitesimaal expanderen van een gas bij druk  $P$  met volume  $dV$  alwaar de arbeid gegeven wordt als

$$dW = P dV. \quad (2.2)$$

In de praktijk duidt arbeid op de 'nuttige' energie-uitwisselingen, waarover controle is en bijvoorbeeld een gewicht kan opheffen.

- *Warmte* is de andere manier waarop energie uitgewisseld kan worden. Warmte kan temperatuur veranderen, maar bijvoorbeeld geen gewicht opheffen.
- een *warmte-/koudebad* of *reservoir* is een systeem zo groot dat de temperatuur invariant blijft onder uitwisseling van elke eindige hoeveelheid warmte.



### 2.2.2 Hoofdwetten van de Thermodynamica

#### 2.2.2.1 Nulde Hoofdwet

*Thermodynamisch evenwicht is transitief: als systeem A in evenwicht is met systeem B en systeem B met systeem C is ook systeem A in evenwicht met systeem C.*

Hieruit valt te besluiten dat temperatuur  $T$  een geldige toestandsfunctie is (net als chemische potentiaal).

#### 2.2.2.2 Eerste Hoofdwet

De totale energie is behouden.

*De differentiaal  $dU = dQ - dW$  is exact, met  $Q$  de warmte en  $W$  de arbeid.*

$U$  wordt de *interne energie* genoemd en deze grootte blijkt overeen te komen met het begrip energie zoals gekend in de fysica.

#### 2.2.2.3 Tweede Hoofdwet

De tweede hoofdwet kent veel verschillende formuleringen en wordt vaak geassocieerd met de zogeheten *Pijl van de Tijd*, een verzamelnaam voor verschillende noties van irreversibiliteit. Hoewel de wetten van de mechanica invariant zijn onder tijdsinversie <sup>1</sup> neemt de mens immers een verschil tussen verleden en toekomst waar. Hoewel deze verschillende formuleringen van de tweede hoofdwet hoofdzakelijk dezelfde fenomenen voorspellen, ontbreekt het de tweede hoofdwet aan een éénduidige interpretatie zoals de meeste fysische wetten die hebben [18, 55]. In deze sectie wordt slechts een korte bespreking gegeven van de tweede hoofdwet vanuit de macroscopische thermodynamica. Anderzijds kan de tweede hoofdwet ook worden besproken vanuit het microscopische standpunt van de statistische mechanica, zie [hoofdstuk 3](#).

De de eerste bekende formuleringen van de tweede hoofdwet werden ontwikkeld aan de hand van gedachte-experimenten met Carnot-motors en dergelijke en zijn

**Formulering 1** *Clausius: Het is onmogelijk een cyclisch proces uit te voeren dat geen ander resultaat heeft dan het absorberen van warmte uit een koudereservoir en afgeven aan een warmereservoir.*

**Formulering 2** *Kelvin: Het is onmogelijk een cyclisch proces uit te voeren dat geen ander resultaat heeft dan het absorberen van warmte uit een reservoir en het produceren van arbeid.*

De formuleringen van Clausius en Kelvin zijn equivalent voor positieve temperaturen. Een hypothetisch systeem dat deze wetten niet

<sup>1</sup> De zwakke wisselwerking buiten beschouwing gelaten.

zou volgen, noemt men een *perpetuum mobile van de tweede soort*. Voor continue cyclische processen kan deze hoofdwet herschreven worden als

$$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0 \quad (2.3)$$

De meeste daaropvolgende versies van de tweede hoofdwet bevatten een begrip entropie  $S$ , waar  $S$  constant blijft voor reversibele processen en  $S$  stijgt in irreversibele processen.

### Formulering 3

$$dS \geq 0 \quad (2.4)$$

Waar  $S$  gedefinieerd wordt als

$$dS = \frac{-\delta Q}{T}. \quad (2.5)$$

Bij het opstellen van een formalisme dat verder gaat dan cyclische variaties zijn echter enkele conceptuele problemen gemoeid, en aannames verschillen tussen de versies van de tweede hoofdwet. Zo bearbudeert Planck de geldigheid van (2.5) specifiek voor ideale gassen en fluïda.

Carathéodory formuleert de tweede hoofdwet dan weer vanop een abstractere topologische manier vertrekkende vanuit een macroscopische toestandruimte  $\Gamma$  (niet de verwarren met de Hamiltoniaanse faseruimte zoals in hoofdstuk 3).

**Formulering 4** *Carathéodory*: In elke open omgeving  $\mathcal{U}_s \subset \Gamma$  van een arbitraire toestand  $s$  zijn er toestanden  $t$  zodat er een open omgeving  $\mathcal{U}_t$  van  $t$  bestaat waarin geen enkele toestand  $r \in \mathcal{U}_t$  adiabatisch bereikt kan worden vanaf  $s$ .

Mits gepaste veronderstellingen die overeenkomen met ‘eenvoudige systemen’ is dit opnieuw equivalent met een wet van de vorm (2.5).

Tot slot is er nog de recentere versie van de tweede hoofdwet van Lieb en Yngvason [22, 55]:

**Formulering 5** *Lieb-Yngvason*: Er bestaat een functie  $S$  gedefinieerd op alle toestanden van alle systemen zodat

1. Wanneer  $s$  en  $t$  toestanden zijn van eenzelfde systeem kan vanuit toestand  $s$  toestand  $t$  bereikt worden als en slechts als  $S(s) \leq S(t)$
2. Wanneer  $s$  en  $t$  toestanden zijn van (mogelijk verschillende) systemen, dan zal
 
$$S((s, t)) = S(s) + S(t)$$

$$S(\alpha s) = \alpha S(s).$$

#### 2.2.2.4 *Derde Hoofdwet*

*De entropie bij temperatuur  $T = 0$  is een universele constante, die  $S(T = 0) = 0$  gekozen kan worden.*



## 3.1 STATISTISCHE FYSICA EN ENSEMBLES

Statistische fysica heeft een centrale plaats in de theoretische fysica. Statistische mechanica, of statistische fysica in het algemeen, onderscheidt zich wel van specifiekere theorieën zoals kwantumelektrodynamica of relativiteit, in het feit dat de methoden niet zozeer binnen een heel specifiek systeem toepasbaar zijn. In de plaats daarvan zijn de methoden van statistische mechanica toepasbaar over een brede klasse aan problemen, a priori los van de precieze microscopische wetten. De fundamenteen liggen grotendeels bij het werk van Boltzmann en Gibbs in de 19de eeuw en zijn nog grotendeels toepasbaar, zelfs in combinatie met kwantummechanica. Toch zijn er sindsdien nog vele discussies geweest over de precieze motiveringen en interpretaties, en dit zowel op fysisch, op wiskundig als op filosofisch vlak die lang niet allemaal afgesloten zijn [6, 18, 37, 49]. Onderstaande samenvatting is voornamelijk gebaseerd op [18].

3.1.1 *Statistische beschrijving van de natuur*

In de klassieke mechanica wordt, op een gegeven moment, de toestand van een systeem met  $N$  vrijheidsgraden volledig gekarakteriseerd door  $2N$  parameters: de vrijheidsgraden  $q_i$  zelf en hun geconjugeerde impulsen  $p_i$ . Deze Hamiltoniaanse toestand kan dan worden voorgesteld als een punt in de corresponderende abstracte  $2N$ -dimensionale faseruimte  $\Gamma$ . De tijdsevolutie van het systeem komt overeen met het afleggen van een pad in  $\Gamma$  zodat

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\partial p_i} = \dot{q}_i & (3.1) \\ \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial q_i} = -\dot{p}_i & (3.2) \end{cases}$$

met  $\mathcal{H}$  de hamiltoniaan van het systeem.

Deze manier om de fysica te beschrijven kent zijn nut, maar is niet altijd aangewezen. Terwijl de bewegingsvergelijkingen van het tweedeeltesprobleem nog exact oplosbaar zijn, is dit niet meer het geval bij drie of meer deeltjes. In het geval dat het aantal deeltjes en vrijheidsgraden beperkt is, kan het aangewezen zijn de bewegingsvergelijkingen numeriek op te lossen. Met deze aanpak worden bijvoorbeeld de bewegingen van de hemellichamen in ons zonnestelsel voorspeld. Alle afwijkingen zullen echter cumuleren zodat voorspellingen

binnen een gewenste foutenmarge slechts tot op beperkte termijn kunnen worden gedaan. De NASA JPL DE-406 simulatie is bijvoorbeeld voor de belangrijkste planeten bruikbaar van 3000 v.C. tot 3000 n.C. en voor kometen slechts van 1599 n.C tot 2200 n.C. [58].

In het geval van een ideaal gas is de situatie nog veel dramatischer: een typisch macroscopisch systeem bevat een aantal deeltjes, en dus ook een aantal vrijheidsgraden, in de orde van het getal van Avogadro  $N_a \approx 6.02 \times 10^{23}$ . In zulk geval is het volstrekt zinloos voorspellingen te doen in termen van deze vrijheidsgraden, zelfs niet numeriek. Alleen nog maar de vergelijkingen of de beginvoorwaarden opschrijven of inbrengen in de computer wordt in de praktijk onmogelijk, met het aantal bits in een terrabyte een factor  $10^{11}$  kleiner dan  $N_a$ . In 2007 bewaarde de gehele wereldbevolking naar schatting in de orde van  $10^{21}$  bits [17].

Een systeem hoeft echter niet altijd beschreven te worden in termen van elke individuele vrijheidsgraad (ook wel *microtoestand* genoemd): vaak zijn slechts een handvol macroscopische parameters van belang, denk aan de thermodynamische probleemstellingen beschreven in [hoofdstuk 2](#). Deze relevante<sup>1</sup> macroscopische parameters definiëren de *macrotoestand* van het systeem.

Het verlies aan informatie door slechts een aantal macroscopische parameters te kennen heeft dan tot gevolg dat de vrijheidsgraden en impulsen in het microscopische beeld niet exact bepaald zijn, maar door een distributie gegeven worden. In het geval van een ideaal gas leidt dit tot kinetische gastheorie, die een uitgebreid studiegebied op zichzelf heeft gevormd [18].

In de oorspronkelijke zin van statistische fysica wordt uitgemiddeld over de verschillende deeltjes, die elk apart onderhevig zijn aan een verdelingsfunctie. Dit resulteert bijvoorbeeld in de Maxwell-Boltzmann-distributie van snelheden in een gas, of algemener, de kans dat een deeltje energie  $E$  heeft is evenredig met  $e^{-\beta E}$ , met  $\beta = k_b T$  de Boltzmannfactor waarin  $k_b$  de Boltzmannconstante en  $T$  de temperatuur bedraagt.

### 3.1.2 Het begrip 'ensemble'

Door de statistiek te beschouwen van individuele deeltjes duiken echter problemen op: ten eerste gaat zo informatie over eventuele correlaties tussen de deeltjes verloren, ten tweede gaat deze aanpak ervan uit dat alle deeltjes onderscheidbaar zijn, wat resulteert in de

<sup>1</sup> Welke parameters relevant zijn hangt af van de precieze opzet van het fysische systeem en deze vraag kan als inherent subjectief worden beschouwd. Volgens een alternatieve aanpak kunnen objectieve criteria worden opgelegd aan parameters om relevant te zijn, maar hierover meer in [sectie 3.2](#).

Gibbs-paradox<sup>2</sup>. In kwantummechanica zijn identieke deeltjes natuurlijk niet-onderscheidbaar.

### 3.1.2.1 In klassieke mechanica

De oplossing van deze problemen bestaat erin dat als centrale object niet de verdelingsfunctie van individuele deeltjes wordt genomen, maar de verdelingsfunctie van de volledige microtoestanden van het systeem: dit geeft een kansdichtheidsverdeling  $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  in de faseruimte  $\Gamma$ . Dit houdt in dat met elke macrotoestand een verzameling aan microtoestanden wordt geassocieerd: het ensemble. Het ensemble bestaat dus uit een oneindig aantal macroscopische kopieën met elk een andere microscopische configuratie. In het geval van een vrij gas, waar alle deeltjes gelijk en ongecorrleerd zijn, herleidt  $\Gamma$  zich tot de productruimte van de faseruimtes van individuele deeltjes, wat terug de oude uitdrukkingen oplevert.

Om het niet-onderscheidbaar karakter van de deeltjes in rekening te brengen, kan fenomenologisch door een telfactor worden gedeeld.

Vanouds worden er drie soorten ensembles als belangrijk beschouwd:

1. Voor geïsoleerde systemen, waarin zowel het aantal deeltjes  $N$  bepaald is als de totale energie  $E$  tot op een precisie  $\Delta$ , spreekt men van het *microcanonisch ensemble*.  $\Delta$  is hierbij groot genoeg zodat het ensemble een groot aantal microtoestanden bevat, maar klein genoeg om macroscopisch als infinitesimaal te kunnen worden beschouwd.
2. Voor gesloten systemen, die een vast aantal deeltjes  $N$  bevatten, maar energie kunnen uitwisselen met hun omgeving, spreekt men van een *canonisch ensemble*.
3. Voor open systemen, die zowel deeltjes als energie met hun omgeving kunnen uitwisselen, spreekt men van een *grootcanonisch ensemble*.

### 3.1.2.2 In de kwantummechanica

Een kwantummechanische microtoestand kan niet langer beschreven worden als punt in een faseruimte, maar vormt een vector in de Hilbertruimte van het systeem. De ensembledichtheid  $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  dient dan ook vervangen te worden door een hermitische operator

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (3.3)$$

waar  $\{\psi_i\}$  de verschillende microtoestanden zijn en telkens  $p_i$  de kans dat het systeem zich in  $\psi_i$  bevindt. Het uitdrukken van de dichtheids-

<sup>2</sup> Een scheiding verwijderen tussen twee ruimtes die eenzelfde gas bevatten verandert de totale entropie.

operator  $\hat{\rho}$  in een orthonormale basis  $\{u_n\}$  levert de dichtheidsmatrix  $\rho_{mn}$  op:

$$\rho_{mn} = \langle u_m | \hat{\rho} | u_n \rangle. \quad (3.4)$$

In de praktijk worden voor de keuze van de basisvectoren  $\{u_n\}$  vaak energie-eigentoestanden gebruikt. Deze commuteren met de Hamiltoniaan en zijn dus stationair. Dit houdt in dat onder een constante hamiltoniaan de diagonaalelementen  $\rho_{nn}$  behouden blijven. Indien er geen ontarding is tussen niveaus  $n$  en  $m$  zullen de offdiagonaalelementen  $\rho_{mn}$  oscilleren met frequentie  $(\epsilon_m - \epsilon_n)/\hbar$ . Dit houdt in dat uitgemiddeld over voldoende lange tijd enkel de diagonaal behouden blijft. Ook in het geval van ontarding kan de basis zodanig gekozen worden dat alle niet-diagonaalelementen verdwijnen.

De dichtheidsoperator die overeenkomt met de overgebleven diagonale dichtheidsmatrix noemen we het *diagonaal ensemble*

$$\overline{|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|} = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| = \hat{\rho}_{\text{diag}}. \quad (3.5)$$

Het is duidelijk dat het aantal elementen in  $\hat{\rho}_{\text{diag}}$  gelijk is aan het aantal dimensies van de volledige Hilbertruimte. Al deze elementen blijven behouden wanneer de hamiltoniaan constant is.

### 3.1.3 Ergodiciteit en Thermalisatie

Een belangrijk gegeven in de statistische fysica is dat een brede klasse aan problemen vanuit een generieke begintoestand naar een evenwichtstoestand evolueert, en statistische fysica is dan ook het meest succesvol bij het bestuderen van systemen in macroscopisch evenwicht. Dit succes is gerelateerd aan het voldoen van het systeem aan het begrip *ergodiciteit* [34]: het gemiddelde nemen over alle realisaties binnen een ensemble op een gegeven tijd is equivalent met het tijds-gemiddelde van een enkele willekeurige realisatie in het ensemble. Beschouw een toestand  $X_0$  in de faseruimte van een klassiek ergodisch systeem met energie  $E$ , dan zal

$$\overline{\delta[X - X(t)]} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \delta(X - X(t)) = \rho_{\text{mc}}(E), \quad (3.6)$$

waar  $X(t)$  het pad is dat de toestand initieel in  $X_0$  aflegt en  $\rho_{\text{mc}}(E)$  het microcanonisch ensemble van toestanden  $X$  met energie  $E$ . Een van de motiveringen hiertoe is het begrip Poincaré recurrence<sup>3</sup>, dat in sommige gevallen rigoureus bewezen kan worden. In het algemeen zullen systemen thermalizeren indien ze voldoende chaotisch zijn,

<sup>3</sup> Elke begintoestand in de verzameling (behalve een deelverzameling met maat nul), zal na tijdsevolutie arbitrair dicht elke andere toestand benaderen.



dit wil zeggen chaotischer dan de quasiperiodische banen voorspeld door het KAM-theorema [7] voor kleine verstoringen op exact oplosbare systemen.

In de kwantummechanica echter wordt het tijdsgemiddelde gegeven door het diagonaal ensemble zoals hierboven aangegeven, met een aantal onafhankelijke behouden grootheden gelijk aan de dimensie van de hilbertruimte, met name de projectie-operatoren op de eigentoestanden. Deze situatie staat in sterk contrast met het klassieke geval waar enkel de totale energie een behouden grootheid is. Omdat algemeen aangenomen wordt dat kwantummechanica de echte theorie is die de werkelijkheid beschrijft, maar de statistische fysica bij evenwicht toch zeer succesvol is gebleken, dienen de wetten van de statistische fysica toch in overeenstemming te worden gebracht met de kwantummechanica. Twee stappen zijn hiervoor nodig [34]:

Ten eerste is de eis dat tijdsuitmiddeling van een enkele kwantumtoestand equivalent is met het volledige ensemble te strikt. In plaats daarvan is het voldoende om van kwantumergodiciteit te spreken als de tijdsgemiddelden van de verwachtingswaarden van de belangrijke macroscopische grootheden  $\{M_\beta\}$  overeenkomen met de kwantumstatistische verwachtingswaarde van deze grootheden over het ensemble, dat wil zeggen

$$\overline{\langle \Psi(t) | M_\beta(t) | \Psi(t) \rangle} = \text{Tr}[M_\beta \hat{\rho}_{\text{diag}}] = \langle M_\beta \rangle_{\text{mc}}. \quad (3.7)$$

Ten tweede is er nood aan een motivering waarom de verwachtingswaarden van deze grootheden over  $\hat{\rho}_{\text{diag}}$  en  $\hat{\rho}_{\text{mc}}$  gelijk zullen worden, waarom deze kwantumergodiciteit kan voldaan zal zijn. Deze motivering wordt geleverd door de *eigentoestandsthermalisatiehypothese* (ETH), ontwikkeld door J.M. Deutsch [12] en M. Srednicki [51]. Volgens de ETH [40] is de eis (3.7), die geschreven kan worden als

$$\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 M_{\alpha\alpha} =: \langle \hat{M} \rangle_{\text{diag}} = \langle \hat{M} \rangle_{\text{mc}} := Z^{-1} \sum_{\substack{\alpha \\ |E_0 - E_{\alpha}| < \Delta E}} M_{\alpha\alpha}, \quad (3.8)$$

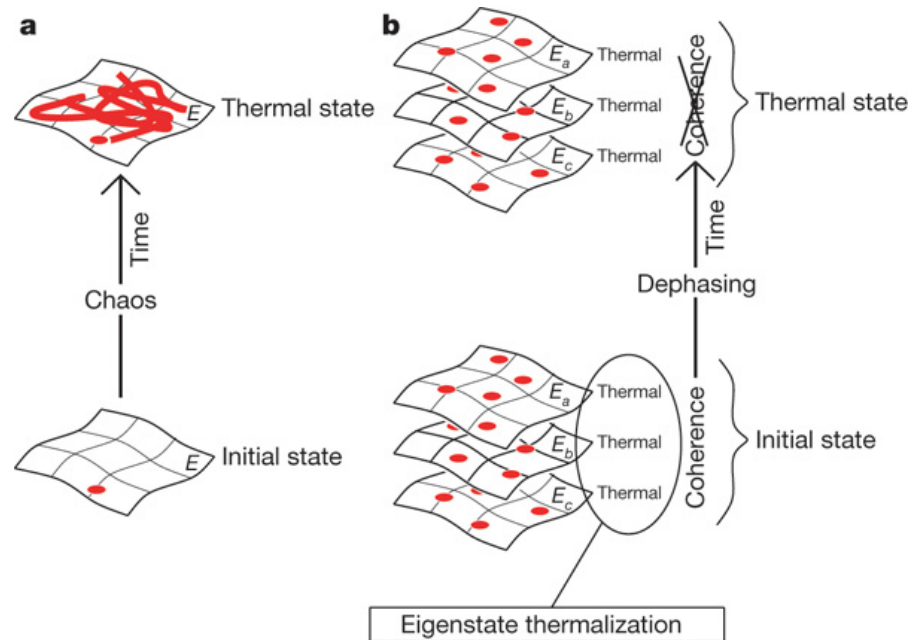
onafhankelijk van de coëfficiënten  $c_{\alpha}$ , voldaan wanneer de fluctuaties op  $M_{\alpha\alpha}$  klein zijn. Dit wil zeggen dat  $M$  een gladde functie is van de energie. Als de meest vertegenwoordigde toestanden in  $\hat{\rho}_{\text{diag}}$  zich in een specifieke energieregio concentreren, dan komen deze eigentoestanden sterk overeen met die uit het microcanonisch ensemble. En omdat de waarden  $M_{\alpha\alpha}$  slechts weinig fluctueren binnen een nauw energiegebied, hebben de gewichten  $|c_{\alpha}|^2$  geen belang voor het berekenen van het gemiddelde. Er is momenteel geen universeel argument dat aangeeft waarom de ETH zou gelden, maar in specifieke problemen blijkt deze wel van toepassing. Het is onder meer aangetoond dat de ETH geldt voor een integreerbare hamiltoniaan licht verstoord door een willekeurige perturbatieve matrix uit een gaussische

verdeling [12] en voor het vrijlaten van deeltjes in een tweedimensionaal rooster die zich initieel allemaal in eenzelfde hoek bevinden [40]. In semiklassieke systemen die klassiek chaotisch zijn volgt de ETH uit Berry's conjecture [5, 51] dat stelt dat de energie-eigentoestanden superposities van vlakke golven met willekeurige amplitudes zijn. In het geval van chaotische biljartballen hebben deze eigentoestanden bijvoorbeeld de vorm

$$\Psi_\alpha(\mathbf{X}) = \mathcal{N} \int d\mathbf{P} A_\alpha(\mathbf{P}) \delta(\mathbf{P}^2 - 2mE_\alpha) e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{X}}. \quad (3.9)$$

Hier zijn  $A_\alpha(\mathbf{P})$  pseudowillekeurige variabelen met gaussische statistiek en  $\langle A_\alpha(\mathbf{P}) A_\beta(\mathbf{P}') \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(3N)}(\mathbf{P} + \mathbf{P}') / \delta(\mathbf{P}^2 - \mathbf{P}'^2)$  wat in de thermodynamische limiet leidt tot impulsen verdeeld volgens een Maxwell-Boltzmann-verdeling.

Indien de ETH geldig is, gedraagt vrijwel elke energie-eigentoestand zich individueel als een evenwichtstoestand. Wanneer de begintoestand zich macroscopisch uit evenwicht bevindt, komt dit doordat de verschillende eigentoestanden op dat moment op een specifieke manier met elkaar interfereren. Dit verschil tussen klassieke en kwantummechanische thermalisatie wordt weergegeven in [figuur 3.1](#).



Figuur 3.1: Thermalisatie in klassieke- en kwantumsystemen [40] : a) in klassieke systemen construeert tijdsevolutie de evenwichtstoestand door de microtoestand de volledige faseruimte te doen doorlopen, b) volgens de ETH bevat elke eigentoestand van de hamiltoniaan al impliciet een evenwichtstoestand maar is deze initieel verscholen wegens coherentie, tijdsevolutie zorgt voor defasering waardoor deze evenwichtstoestand manifest wordt.

3.1.4 *Het Boltzmann-Gibbs ensemble*

In deze sectie wordt een uitdrukking afgeleid voor het ensemble corresponderend met een macroscopisch systeem in evenwicht.

Beschouw een geïsoleerd systeem in evenwicht bestaande uit de combinatie van twee gesloten subsystemen met hamiltonianen  $\mathcal{H}_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1)$  en  $\mathcal{H}_2(\mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2)$  respectievelijk. De deeltjesaantallen bedragen respectievelijk  $N_1$  en  $N_2$ . In het microcanonisch ensemble van het gecombineerde systeem moet de totale energie zich bevinden tussen  $E$  en  $E + 2\Delta$ . Dit laat toe dat de subsystemen waarden aannemen waarvoor geldt dat

$$E < (E_1 + E_2) < E + 2\Delta. \quad (3.10)$$

Er kan aangetoond worden dat als beide systemen macroscopisch zijn, de waarschijnlijkheden om de systemen in bepaalde energietoestanden te vinden pieken rond hun verwachtingswaarden  $E'_1, E'_2$  en het zeer onwaarschijnlijk is dat de waarden voor  $E_1, E_2$  op een gegeven moment hier veel van verschillen. Veronderstel dat  $N_2 \gg N_1$  en  $E'_2 \gg E'_1$ .  $\Gamma_2(E_2)$  is het volume dat systeem 2 in zijn eigen faseruimte inneemt wanneer het een energie  $E_2$  bezit. De waarschijnlijkheid dat systeem 1 zich in een toestand  $(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1)$  bevindt op een nauwkeurigheid  $d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2$  na, is dan evenredig met  $d\mathbf{p}_1 d\mathbf{q}_1 \Gamma_2(E_2)$ , waar  $E_2$  bepaald wordt door  $E_2 = E - E_1$ . Dus is

$$\rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \propto \Gamma_2(E - E_1). \quad (3.11)$$

Omdat enkel waarden rond  $E_1 = E'_1$  belangrijk zijn en  $E'_1 \ll E$ , zal voor vrijwel alle microtoestanden  $E_1 \ll E$ . De Boltzmann-entropie  $k_B \log \Gamma$  van systeem 2 kan dan geëxpandeerd worden als

$$k_B \log \Gamma_2(E - E_1) = S_2(E - E_1) = S_2(E) - E_1 \left[ \frac{\partial S_2(E_2)}{\partial E_2} \right]_{E_2=E} + \dots \quad (3.12)$$

$$\approx S_2(E) - \frac{E_1}{T} \quad (3.13)$$

waar de temperatuur  $T$  gedefinieerd werd als  $T = \frac{\partial E_2}{\partial S_2}$ .

Hieruit volgt dat

$$\Gamma_2(E - E_1) \approx \exp \left[ \frac{1}{k_B} S_2(E) \right] \exp \left( -\frac{E_1}{k_B T} \right). \quad (3.14)$$

Wegens (3.11) laat het feit dat  $E_1 = \mathcal{H}_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1)$  ons toe om voor de ensembledichtheid van systeem 1 de uitdrukking

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = Z^{-1} e^{-\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})/k_B T} \quad (3.15)$$

te nemen.  $Z$  is de toestandssom die ervoor zorgt dat  $\int d\Gamma \rho = 1$ . In plaats van systeem 1 en systeem 2 kunnen we nu spreken over 'het'

systeem en het bad respectievelijk, en daarom werden de indices 1 ook weggelaten.

In het kwantumgeval moet de integratie dan door een som over de microtoestanden  $|\phi_n\rangle$  van het systeem worden vervangen. Dit resulteert in een dichtheidsmatrix met elementen  $\rho_{mn} = \delta_{mn} e^{-\beta E_n}$ .

De dichtheidsoperator is dan

$$\hat{\rho} = \sum_n |\phi_n\rangle e^{-\beta E_n} \langle\phi_n| = e^{-\beta \hat{H}} \sum_n |\phi_n\rangle \langle\phi_n| = e^{-\beta \hat{H}} \quad (3.16)$$

met  $\hat{H}$  de hamiltoniaan van het systeem.

Een ander belangrijk resultaat is dat microcanonische, canonische en grootcanonische ensembles bij evenwicht equivalent worden in de thermodynamische limiet: de fluctuaties rond de verwachtingswaarden van  $N$  en  $E$  worden verwaarloosbaar klein<sup>4</sup>. Dit sluit intuïtief aan bij het feit dat in de statistiek een hoger aantal realisaties de onzekerheid op de verwachtingswaarde doet afnemen. Voor een formeler bewijs, zie [18].

### 3.2 HET VERALGEMEENDE GIBBS-ENSEMBLE

Hierboven werd de Gibbs-distributie afgeleid op de gebruikelijke manier: door een objectieve interpretatie van statistische mechanica. Hiermee wordt bedoeld dat alle parameters, en in het bijzonder de entropie, vaststaande waarden hebben. Deze objectieve parameters zijn in principe empirisch meetbaar en alle waarnemers zullen het eens zijn over de waarden. Het is ook in deze context dat kinetische wetten worden afgeleid vanuit de onderliggende microscopische dynamica.

In het midden van vorige eeuw kwam E.T. Jaynes [19, 20] met een nieuwe aanpak: de subjectieve interpretatie. Volgens de subjectieve interpretatie hebben niet alle parameters een waarde onafhankelijk van de observator, het is daarentegen onze kennis van het ensemble die de statistiek bepaalt. Deze dubbele interpretatie is een uitloper van een oudere tweedracht in de interpretatie van kans zelf [11], die ook op andere vlakken nog actueel is voor de fysica [27].

Belangrijk voor de aanpak van Jaynes was de opmars van de informatietheorie. Shannon [48] associeert met elke verdelingsfunctie  $p_i$  over mogelijke toestanden  $i$  een entropie

$$S_s = - \sum_i p_i \log p_i, \quad (3.17)$$

een unieke extensieve maat voor wanorde. Het is eenvoudig in te zien dat in het geval van een uniforme distributie  $p_i = 1/N$  de Shannon-entropie  $S_s = \log N$  op een voorfactor na gelijk is aan de Boltzmann-

<sup>4</sup> In uitzonderlijke gevallen is dit niet geldig, bijvoorbeeld in de overgangsregio van eerste orde fase-overgangen.

entropie. Hierdoor stelt Jaynes dat Shannon-entropie een fundamenteeler concept is dan Boltzmann-entropie. Het feit dat we een tweede hoofdwet observeren, is louter een gevolg van het verliezen aan informatie door de observator, in het bijzonder verlies van coherentie of verlies van correlaties. Deze aanpak rechtvaardigt ook bijvoorbeeld het verband te maken tussen het Boltzmann H-theorema dat de microscopische thermalizatie van een ideaal gas beschrijft [18] en de tweede hoofdwet als entropietoename.

In de visie van Jaynes kan statistische mechanica opgevat worden als statistische inferentie. Een waarnemer heeft slechts beperkte kennis van de toestand van het systeem en zoekt naar de meest waarschijnlijke toestand gegeven zijn metingen. Deze ‘least biased estimate’ komt dan overeen met de verdeling met hoogste entropie die de juiste verwachtingswaarden oplevert. Hoe hoger de entropie, hoe meer wanorde en hoe hoger de waarschijnlijkheid van de verdeling. Enkel de gegeven voorwaarden leggen een beperking op, maar het is onmogelijk uit te gaan van meer kennis dan dat. Gibbs merkte al op dat het maximaliseren van de (Boltzmann-)entropie onder de juiste eisen in energie en deeltjesaantal de juiste verdelingsfunctie uit [sectie 3.1.4](#) opleverde, maar het ontbrak hem toen aan een goede motivering voor deze methode.

In het formalisme van Jaynes wordt de toestand gekarakteriseerd door een grootheid  $x$  die de discrete waarden  $x_i$  kan aannemen, zodat  $i \in \{1, \dots, n\}$  een toestand definieert. Het systeem bevindt zich ten allen tijde in exact één van deze toestanden. Stel dat de observator de kansen  $p_i$  van de corresponderende toestand niet kent. Wel kent hij, bijvoorbeeld door metingen, de verwachtingswaarde van  $m$  toestandsfuncties

$$\langle f_r(x) \rangle = \sum_i p_i f_r(x_i) \quad (3.18)$$

waar  $r \in \{1, \dots, m\}$ . Daarnaast geldt nog dat een kansmaat moet voldoen aan

$$\sum_i p_i = 1. \quad (3.19)$$

De meest waarschijnlijke verdeling onder de gegeven voorwaarden, wordt nu gevonden door het maximaliseren van de entropie (3.17), rekening houdend met de voorwaarden (3.18) en (3.19). Dit wordt gedaan door het invoeren van de  $m + 1$  lagrangemultiplicatoren  $\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_m$ , waarbij  $\mu_0$  met voorwaarde (3.19) overeenkomt en de overige  $\mu_r$  met  $f_r$ .

De maximalisatie levert een verdeling op van de vorm

$$p_i = \exp[-\mu_0 - \mu_1 f_1(x_i) - \dots - \mu_m f_m(x_i)] \quad (3.20)$$

$$= Z^{-1} \exp[-\mu_1 f_1(x_i) - \dots - \mu_m f_m(x_i)] \quad (3.21)$$

met toestandssom

$$Z(\mu_1, \dots, \mu_m) = \sum_i \exp[-\mu_1 f_1(x_i) - \dots - \mu_m f_m(x_i)]. \quad (3.22)$$

De parameters  $\mu_r$  kunnen nu bepaald worden via de relaties

$$\begin{cases} \langle f_r(x) \rangle = -\frac{\partial}{\partial \mu_r} \ln Z & r \neq 0 \\ \mu_0 = \ln Z. \end{cases} \quad (3.23)$$

Jaynes toont verder aan dat het voor de berekeningen geen verschil maakt of het de verwachtingswaarden  $\langle f_r \rangle$  dan wel de parameters  $\mu_r$  zijn die gekend zijn, wat analoog is aan de ensemble-equivalentie beschreven in [sectie 3.1.4](#).

Het vervangen van de klassieke toestandsfuncties  $f_r$  door kwantummechanische operatoren  $\hat{F}_r$  verandert weinig aan de resultaten [19]. Het voornaamste verschil met het klassieke geval is dat sommaties over toestanden door het spoor over de dichtheidsmatrix moeten vervangen worden. De Shannon-entropie in het klassieke geval wordt dan in het kwantummechanische geval gegeven door de von-Neumann-entropie

$$S_{vN} = -\text{Tr } \hat{\rho} \log \hat{\rho}. \quad (3.24)$$

Dit resulteert voor de kwantumstatistische fysica in een dichtheidsmatrix

$$\hat{\rho}_{GGE} = Z^{-1} \exp[-\mu_1 \hat{F}_1 - \dots - \mu_m \hat{F}_m] \quad (3.25)$$

waar

$$Z(\mu_1, \dots, \mu_m) = \text{Tr} [\exp(-\mu_1 \hat{F}_1 - \dots - \mu_m \hat{F}_m)] \quad (3.26)$$

en

$$\langle \hat{F}_r \rangle = -\frac{\partial}{\partial \mu_r} \ln Z. \quad (3.27)$$

Het is formule (3.25) die als definitie voor een veralgemeend Gibbs-ensemble zal gebruikt worden. Het is duidelijk dat als, zowel als in het klassieke als in het kwantumgeval, enkel energie of temperatuur enerzijds gekend zijn en anderzijds deeltjesaantal of chemische potentiaal, het GGE zich herleidt tot de oude Boltzmann-Gibbs-verdeling.

Voorgaande analyse lijkt misschien de indruk te geven dat thermodynamica en statistische mechanica slechts fenomenologische modellen zijn, met informatietheorie als de diepere, onderliggende theorie. Het is het vermelden waard dat de waarheid iets gecompliceerder is: gedachte-experimenten als Maxwell's demon tonen de nood om evenzeer informatie vanuit thermodynamisch standpunt te bestuderen. J.M.R. Parrondo et al. slaagden er vorig jaar (2015) in dit op een systematische manier te doen [31]. Ook uit praktisch standpunt kan deze connectie belangrijk zijn [57].

### 3.2.1 *Optimalisatie van het GGE*

Recent hebben D. Sels en M. Wouters [46] een methode ontwikkeld om GGE's te construeren vanuit een meer objectief standpunt. De doelstelling is hier anders dan het opzet van Jaynes: waar de waarnemer bij Jaynes noodgedwongen slechts beperkte informatie had om vanuit te vertrekken, wordt hier de omgekeerde vraag bestudeerd: Wat is de minimale informatie nodig om nog een goede beschrijving van de echte toestand te bekomen? De exacte stationaire toestand wordt beschreven door het diagonaal ensemble  $\hat{\rho}_{\text{diag}}$ , dat alle mogelijke microtoestanden van het veeldeeltjessysteem onderscheidt. Zoals hierboven besproken groeit dit ensemble echter exponentieel in de systeemgrootte, waardoor  $\hat{\rho}_{\text{diag}}$  onhandelbaar wordt voor praktische berekeningen omwille van de argumenten aangehaald in [sectie 3.1.1](#). In het geval van thermalisatie (geldigheid van de ETH) is enkel de energie een belangrijke behouden grootheid, maar niet alle systemen voldoen hieraan. Bij de objectieve aanpak wordt op een systematische manier nagegaan welke grootheden  $\hat{I}_1$  het belangrijkste zijn om te kennen. Hiermee kan dan een veralgemeend Gibbs-ensemble  $\hat{\rho}_{\text{GGE}} = \exp[-\sum_l \alpha_l \hat{I}_l]$  worden geconstrueerd om  $\hat{\rho}_d$  zo goed mogelijk te benaderen met zo weinig mogelijk grootheden. Een mogelijke aanpak bestaat erin de Kullback-Leibler afstand<sup>5</sup> tussen  $\hat{\rho}_{\text{GGE}}$  en  $\hat{\rho}_d$  te minimaliseren.

## 3.3 BELANG VAN GGE'S

Jaynes geeft zelf enkele mogelijke toepassingen van GGE's waar behouden grootheden als druk of spinpolarisatie belangrijk zijn. Het ligt voor de hand om de behouden grootheden als gekend te beschouwen: als een grootheid  $G$  behouden is, zorgt kennis op tijd  $t = 0$  automatisch voor kennis van de grootheid op alle daaropvolgende tijden en dient deze dus in rekening te worden gebracht. De grote kracht van veralgemeende Gibbs-ensembles schuilt dan ook in het in rekening brengen van behouden grootheden. Het feit dat GGE's veel gebruikt worden om behouden grootheden in rekening te brengen betekent echter niet dat elk GGE a priori stationair moet zijn, zoals beschreven in [8]. Ondanks het belang van de identificatie tussen informatietheorie en statistische mechanica, werd het GGE aanvankelijk niet veel gebruikt in de praktijk.

Het laatste decennium is er een hernieuwde interesse in de studie van thermalisatie in kwantumsystemen. De theoretische voorspelling

<sup>5</sup> De Kullback-Leibler afstand of kwantum-relatieve entropie tussen twee dichtheidsmatrices  $\hat{\rho}$  en  $\hat{\sigma}$  wordt gedefinieerd als

$$D_{\text{KL}}(\hat{\rho}||\hat{\sigma}) := \text{Tr}(\hat{\rho}(\log(\hat{\rho}) - \log(\hat{\sigma}))). \quad (3.28)$$

gen kunnen hier met de huidige technieken nu ook experimenteel getest worden, bijvoorbeeld met de hulp van ultrakoude gassen (zie [34] voor een overzicht van theorie en experimenten). Er blijkt in het bijzonder dat integreerbare systemen<sup>6</sup>, die niet thermaliseren tot een klassiek Gibbs-ensemble, in veel gevallen toch nog een stationaire eindtoestand bereiken. Rigol et al. [39] stelden in 2007 voor deze eindtoestanden generiek te beschrijven door middel van een GGE, in de geest van een aanpak die in 1970 door M. D. Girardeau [14] specifiek werd gebruikt bij studie van het XY-spinmodel. Dit integreerbaar zijn komt overeen met het breken van ergodiciteit<sup>7</sup>.

Volgens de gangbare methode bij modelsystemen worden als behouden grootheden ééndeeltes-bezettingen gebruikt, en dat zal ook onze aanpak zijn. De aanpak in referentie [46] wijst erop dat in sommige gevallen tweedeeltes-correlatiefuncties belangrijk zijn voor een kwantitatief correcte beschrijving, maar daarmee wordt Wick's theorema onbruikbaar en het probleem dus veel moeilijker. Er is geen reden om aan te nemen dat hogere orde correlaties veel veranderen aan het optreden van kwalitatieve fenomenen.

---

6 De integreerbaarheid van systemen is een intensief bestudeerd wiskundig concept [4]. Voor onze doeleinden is het echter voldoende een integreerbaar systeem te definiëren als een systeem met meer belangrijke behouden grootheden dan totale energie en deeltjesaantal alleen.

7 Recent is gebleken dat ook in ergodetische, niet-integreerbare systemen thermalisatie kan vermeden worden voor een specifieke klasse Hamiltonianen door het fenomeen van 'veeldeelteslocalisatie' [29], gelijkaardig aan Anderson-localisatie.



## THERMODYNAMICA VAN GESLOTEN KWANTUMSYSTEMEN

---

De laatste decennia ontstond een interesse in de thermodynamica van kwantumsystemen en met name het onttrekken van arbeid. Met name de bespreking van Allahverdyan et al. [3] over het onttrekken van arbeid uit gesloten kwantumsystemen via unitaire operaties, is van groot belang voor deze thesis.

Omdat dit hoofdstuk van een grotendeels technische aard is, vatten we de voornaamste resultaten samen. De eigenwaarden van de dichtheidsmatrix moeten altijd behouden blijven in een gesloten systeem, en voor een evenwichtstoestand is deze dichtheidsmatrix diagonaal in de energiebasis. De meeste arbeid kan worden onttrokken door het systeem in de laagste-energiestoestand te brengen. Bij deze laagste-energiestoestand (4.15) is de sortering van energieniveaus en bezettingen omgekeerd, zodat het laagste energieniveau de hoogste bezetting kent.

### 4.1 ARBEID ONTTREKKEN UIT GESLOTEN KWANTUMSYSTEMEN

Beschouw een kwantummechanisch systeem  $S$  in evenwicht, uitgerust met een hamiltoniaan  $\hat{H}$  en een dichtheidsoperator  $\hat{\rho}$  [3, 47].  $S$  wordt gekoppeld met een extern macroscopisch systeem  $M$  waarnaar we energie willen transfereren.  $M$  wordt klassiek behandeld zodat het effect van  $M$  op  $S$  een proces is dat de hamiltoniaan tijdsafhankelijk maakt:  $\hat{H}(t) = \hat{H} + \hat{V}(t)$ . Bij de eis dat dit proces cyclisch is geldt  $\hat{V}(0) = \hat{V}(T) = 0$ . Uit behoud van energie (eerste hoofdwet) volgt nu automatisch dat voor de arbeid  $W$  die  $S$  op  $M$  uitoefent geldt dat

$$W = \text{Tr}[\hat{H}\hat{\rho}(0)] - \text{Tr}[\hat{H}\hat{\rho}(T)]. \quad (4.1)$$

Aangezien tijdsevolutie in de kwantummechanica door unitaire operaties wordt beschreven en unitaire transformaties de von Neumann-entropie bewaren, verloopt de evolutie isentroop. De maximale arbeid die dan kan onttrokken worden is dan

$$W_{\text{ise}}^{\text{max}} = E(\hat{\rho}_0) - E(\hat{\rho}_f) \quad (4.2)$$

$$= E(\hat{\rho}_0) - (TS(\hat{\rho}_f) + F(\hat{\rho}_f)) \quad (4.3)$$

$$= (E_0 - TS(\hat{\rho}_0) - F(\hat{\rho}_f)) \quad (4.4)$$

$$= F(\hat{\rho}_0) - F(\hat{\rho}_f). \quad (4.5)$$

De maximale arbeid wordt dus geleverd voor een eindtoestand die zich in een Gibbs-toestand bevindt: dit is immers de toestand met de laagste energie voor een gegeven entropie. Dit geeft

$$\hat{\rho}_f = \frac{e^{-\beta_f \hat{H}}}{Z} \quad (4.6)$$

met toestandssom

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta_f \hat{H}}. \quad (4.7)$$

De inverse temperatuur  $\beta$  wordt bepaald door de gelijkheid van de entropieën voor en na de cyclus:

$$S(T) = S(0) \quad (4.8)$$

$$k_B \log Z + k_B \beta E = -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \log \hat{\rho}_0] \quad (4.9)$$

$$k_B \log Z - k_B \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = -k_B \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \log \hat{\rho}_0] \quad (4.10)$$

De tweede en laatste gelijkheid maken gebruik van de definitie van vrije energie  $F = E - TS$  en de derde gelijkheid gebruikt het feit dat  $S(\hat{\rho}_0) = S(\hat{\rho}_f)$ . Vergelijking (4.5) komt overeen met het standaardresultaat in de thermodynamica voor systemen interagerend met een reservoir, waar de temperatuur gebruikelijk ook op dit reservoir is gedefinieerd. In ons geval is het de temperatuur van een Gibbs-toestand met een entropie gelijk aan die van de begintoestand. Merk op dat uit (4.5) volgt dat geen arbeid kan onttrokken worden uit Gibbs-toestanden die reeds minimale energie hebben voor hun entropie.

Het behoud van entropie alleen is echter niet strikt genoeg om de tijdsevolutie van gesloten systemen te beschrijven. Onder unitaire tijdsevolutie behouden deze hun volledig spectrum aan eigenwaarden en dus alle Rényi-entropieën<sup>1</sup> en niet alleen de Von Neumann-entropie.

Om de maximale arbeid bereikbaar via unitaire operaties te vinden, dient

$$E_f = \text{Tr} \hat{U} \hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger \hat{H} \quad (4.11)$$

geminimaliseerd te worden over alle unitaire operatoren  $\hat{U}$ . De infinitesimale variaties van  $\hat{U}$  kunnen geschreven worden als  $\delta \hat{U} = \hat{X} \hat{U}$ , met  $\hat{X}$  een willekeurige infinitesimale en anti-hermitische operator. Dit resulteert tot op laagste orde in  $\hat{X}$  voor  $E_f$  in

$$\delta E_f = \text{Tr} \left( \hat{X} \hat{U} \hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger \hat{H} - \hat{U} \hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger \hat{X} \hat{H} \right) = \text{Tr} \hat{X} [\hat{\rho}(T), \hat{H}]. \quad (4.12)$$

<sup>1</sup> Rényi entropieën worden gedefinieerd als  $H_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log(\sum_i p_i^\alpha)$ . De limiet  $\alpha \rightarrow 1$  resulteert in de Shannon-entropie en, toegepast op kwantummechanica, waar de sommaties door het spoor moeten vervangen worden, levert deze limiet de von Neumann-entropie.

Omdat voor minimale  $E_f$  deze waarde stationair is, moet  $\delta E_f = 0$ . Hieruit volgt dat  $\hat{\rho}(T)$  en  $\hat{H}$  commuteren en dus dezelfde eigenbasis hebben. Eerder bepaalde unitariteit al dat de spectra van  $\hat{\rho}_0$  en  $\hat{\rho}(T)$  gelijk zijn.

Worden de operatoren geschreven als

$$\hat{\rho}_0 = \sum_{j \geq 1} r_j |r_j\rangle \langle r_j| \quad r_1 \geq r_2 \geq \dots \quad (4.13)$$

$$\hat{H} = \sum_{k \geq 1} \epsilon_k |\epsilon_k\rangle \langle \epsilon_k| \quad \epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \dots, \quad (4.14)$$

dan wordt de minimale energie bereikt voor

$$\hat{\rho}(T) = \sum_j r_j |\epsilon_j\rangle \langle \epsilon_j|. \quad (4.15)$$

De finale dichtheidsmatrix is dus diagonaal in de energiebasis, wat wil zeggen dat er geen coherentie is. Er is nog een alternatieve manier om dit in te zien: de verwachtingswaarde van de finale energie wordt gegeven door  $E_f = \text{Tr}(\hat{H}\hat{\rho}(T)) = \sum_n E_n d_n$  met  $\{d_n\}$  de diagonaal-elementen. De diagonaal-elementen worden niet behouden door de unitaire evolutie, maar de eigenwaarden  $\{p_n\}$  worden wel behouden en beide rijen zijn aan elkaar gerelateerd door het Schur-Horn theorema<sup>2</sup>. Net omdat de gelijkheid moet gelden voor  $l = N$  wordt de energie minimaal als deze geldt voor elke  $l$ . De verwachtingswaarde voor de arbeid die unitair onttrokken wordt uit  $S$  bedraagt dan

$$W_{\text{uni}}^{\text{max}} = \sum_{j,k} r_j \epsilon_k \left( |\langle r_j | \epsilon_k \rangle|^2 - \delta_{jk} \right). \quad (4.17)$$

Voor macroscopische systemen stijgt het mogelijke aantal toestanden exponentieel in de systeemgrootte zodat het spectrum er dicht is, bijgevolg zal de finale toestand ook beter een Gibbsverdeling kunnen benaderen waardoor ook de onttrekbare arbeid (4.17) de eerdere uitdrukking (4.5) zal benaderen.

Een evolutie-operator die (4.17) doet bereiken wordt gevormd door

$$\hat{U} = \sum_j |\epsilon_j\rangle \langle r_j|. \quad (4.18)$$

In het interactiebeeld bij de hamiltontiaan  $\hat{H} + \hat{V}(t)$  is er een evolutie-operator  $\hat{U}_I$  die voldoet aan

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t)}{dt} = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{U}_I(t) \quad (4.19)$$

<sup>2</sup> Schur-Horn theorema: Een hermitische matrix  $\rho$  met diagonaal-elementen  $\{d_n\}_{n=1}^N$  en eigenwaarden  $\{p_n\}_{n=1}^N$ , beide aflopend gesorteerd, bestaat als en slechts als

$$\forall l = 1, \dots, N: \sum_{n=1}^l d_n \leq \sum_{n=1}^l p_n, \quad (4.16)$$

waarbij de gelijkheid steeds geldt voor  $l=N$  omdat het spoor basisonafhankelijk is.

met  $\hat{U}_I(0) = 1$ . Hier is  $\hat{U}_I(T) := e^{i\hat{H}T/\hbar} \mathbf{U} = e^{-i\hat{\Lambda}T/\hbar}$ , waarbij  $\hat{\Lambda}$  via diagonalisatie kan verkregen worden. Neem voor  $\hat{U}_I(t)$  de vorm  $\hat{U}_I(t) = e^{-i\hat{\Lambda}\phi(t)}$  met  $\phi(0) = \dot{\phi}(0) = \dot{\phi}(T) = 0$  en  $\phi(T) = T$ . Dan beschrijft de potentiaal

$$\hat{V}(t) = \dot{\phi}(t) e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\Lambda} e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (4.20)$$

volgens (4.19) een cyclische potentiaal die de unitaire operatie (4.18) doet bereiken. Deze  $\hat{V}(t)$  is niet uniek.

#### 4.2 MAJORISATIE IN DE THERMODYNAMICA

Beschouw twee mogelijke begintoestanden  $\hat{\rho}_0$  en  $\hat{\sigma}_0$  van een systeem  $S$ , met  $E(\hat{\rho}_0) = E(\hat{\sigma}_0)$ . Als  $S$  macroscopisch is en evenwicht kan bereiken, is deze evenwichtstoestand gelijk in beide gevallen en wordt wegens (4.5) de onttrekbare entropie enkel bepaald uit de entropie van de begintoestand. De situatie is echter verschillend voor eindige systemen [3]. Zoals hierboven besproken kunnen deze eindige (gesloten) systemen niet tot een Gibbs-toestand relaxeren en een gevolg hiervan is dat  $S(\hat{\rho}_0) < S(\hat{\sigma}_0)$  niet langer impliceert dat uit  $\hat{\rho}_0$  meer arbeid is te onttrekken dan uit  $\hat{\sigma}_0$ , er is dus een ander criterium nodig om de arbeid te kunnen vergelijken die uit twee begintoestanden kan worden onttrokken. Het verschil in onttrekbare arbeid bedraagt

$$\Delta W = \sum_{j \geq 1} (s_j - r_j) \epsilon_j = \sum_{k \geq 1} (\epsilon_{k+1} - \epsilon_k) \sum_{j=1}^k (r_j - s_j). \quad (4.21)$$

Herinner hierbij de omgekeerde rangschikking van eigenwaarden van de dichtheidsmatrices en de hamiltoniaan. Het is nuttig dit resultaat te bekijken in het licht van majorisatietheorie [25]. In de kwantumstatistische mechanica majoriseert  $\hat{\rho}$  de operator  $\hat{\sigma}$ , genoteerd als  $\hat{\rho} \succ \hat{\sigma}$ , als de respectievelijke eigenwaarden  $\{r_j\}$  en  $\{s_j\}$ , aflopend gesorteerd, voldoen aan

$$\forall k \geq 1 : \sum_{j=1}^k r_j \geq \sum_{j=1}^k s_j. \quad (4.22)$$

Uit (4.21) blijkt dan dat  $\hat{\rho} \succ \hat{\sigma}$  een voldoende voorwaarde is opdat uit  $\hat{\rho}$  meer arbeid valt te onttrekken dan uit  $\hat{\sigma}$ . Deze voorwaarde is transitief en  $\hat{\rho}_0 \succ \hat{\sigma}_0$  impliceert  $S(\hat{\rho}_0) < S(\hat{\sigma}_0)$ , maar is sterker. Het geval  $\hat{\rho}_0 \not\succeq \hat{\sigma}_0$  impliceert niet dat  $\hat{\sigma}_0 \succ \hat{\rho}_0$ .

#### 4.3 OVERIGE STATE-OF-THE-ART

Allahverdyan et al. [2] tonen ook rigoureus de geldigheid aan van Lord Kelvin's formulering van de tweede hoofdwet voor kwantum-systemen in evenwicht. De auteurs maken hiertoe gebruik van de

kwantumthermodynamische aanpak van [21], die op zijn beurt, voor systemen met een eindigdimensionale hilbertruimte, een vereenvoudiging maakt van de technische aanpak uit [35] op basis van  $C^*$ -algebra's.

Zoals uiteengezet in [24] kan de kwantumthermodynamica ook worden aangewend voor systemen die expliciet een warmtebad bevatten en een toestel om arbeid op te slagen (een gewicht dat kan worden opgehoft of verlaagd). In dit geval wordt de onttrekbare arbeid niet bepaald door (4.17), maar correspondeert het resultaat met (4.5), mits de vrije energie op een bijzondere manier wordt berekend gerelateerd aan de Kullback-Leibler-afstand tussen de toestand en de corresponderende Gibbstoestand. In [50] worden voorgaande resultaten nog veralgemeend naar systemen waar de totale energie niet exact behouden moet blijven. Er wordt aangetoond dat de tweede hoofdwet ook in deze situatie geldig is en er een reversibele carnot-motor kan worden geconstrueerd. Op experimenteel vlak verscheen onlangs (april 2016) een artikel waarin de auteurs verklaren een motor te hebben geconstrueerd die bestaat uit één atoom [41]. Waar voorgaande onderzoeken voornamelijk gericht zijn op het bestuderen van systemen die eindig of klein zijn als dusdanig, ligt de focus in ons onderzoek op de studie van een kwantumsysteem in de thermodynamische limiet: het systeem wordt groot genoeg beschouwd om fluctuaties te verwaarlozen. De invloed van kwantummechanica voor dit systeem bevindt zich dan bij het feit dat het systeem integreerbaar is (zie verder), waardoor het systeem zich gedraagt alsof het reeds inherent warmte- en koudebaden bevat, zodat het niet nodig is deze extern te beschouwen.

In deze thesis wordt uitgegaan van een ensemblebeschrijving, de gebruikelijke aanpak van thermodynamica en statistische fysica. Deze ensemblebeschrijving doet uitspraken over de gemiddelde resultaten die te verwachten zijn bij het herhaald uitvoeren van een experiment. Aan de andere kant is er ook de zogenaamde single-shot aanpak, die uitspraken doet over individuele realisaties van het experiment. In [13] werd het onttrekken van arbeid bijvoorbeeld beschreven vanuit een single-shot aanpak, ook gebruik makend van majorisatie.

Zeer recent verscheen ook een manuscript [32] waarin Perarnau-Llobet et al. het onttrekken van arbeid en entropie uit veralgemeende Gibbs-ensembles (zie hoofdstuk 3) bestuderen. De aanpak in dit manuscript verschilt echter op een aantal vlakken van de opzet in deze thesis. Ten eerste beschrijven de auteurs tijdsevolutie door opeenvolgende quenching in tegenstelling tot onze aanpak met unitaire evolutie, en ten tweede wordt in [32] de link met Bragg-spectroscopie niet gemaakt.



In dit hoofdstuk worden twee gerelateerde methodes besproken waarop licht kan interageren met materie. Meerbepaald kan (1) een statisch optisch rooster worden gecreëerd dat massieve deeltjes kan opsluiten en (2) kan een tijdsafhankelijke optische potentiaal worden aangevend om de externe vrijheidsgraden van de materie te wijzigen, wat bekend staat als Bragg-spectroscopie [9, 33, 38]. Bragg-spectroscopie onderscheidt zich hiermee van de meeste spectroscopische methoden, die de interne vrijheidsgraden van de materie onderzoeken. In dit hoofdstuk wordt er stilzwijgend van uitgegaan dat de deeltjes in kwestie atomen zijn, terwijl de resultaten zoals de Bragg-hamiltoniaan later zullen worden gebruikt voor niet-gespecificeerde deeltjes. Met andere woorden, in dit hoofdstuk wordt getoond hoe de opzet van deze thesis bijvoorbeeld kan worden gerealiseerd met atomen, wat niet wil zeggen dat dit noodzakelijk de enige mogelijke realisatie is.

### 5.1 EEN OPTISCH ROOSTER

De potentiaal van een dipool met elektrisch dipoolmoment  $\mathbf{d}$  in een (klassiek) elektrisch veld  $\mathbf{E}$  [33] kan geschreven worden als

$$V(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (5.1)$$

Een belangrijk voorbeeld is een monochromatisch oscillerend veld

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)e^{-i\omega t} + \text{h.c.} \quad (5.2)$$

Een veld van deze vorm kan gerealiseerd worden door interferentie van meerdere lasers die lichtstralen produceren met eenzelfde frequentie. Dit elektrisch veld induceert ook een dipoolmoment van de atomen

$$\langle \mathbf{d} \rangle = \alpha(\omega) (\mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \text{h.c.}) \quad (5.3)$$

met  $\alpha(\omega)$  de dynamische polariseerbaarheid. Door de polarizatie ontstaat er een verandering in de energie van het systeem, een Starkverschuiving. Het effect van deze Starkverschuiving op de atomen kan volgens (5.1) worden beschreven door middel van een effectieve potentiaal

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\overline{\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t)}. \quad (5.4)$$

De lijn staat voor tijdsuittmiddeling; deze is gerechtvaardigd zolang de oscillatiefrequentie van het laserveld [5.2] veel hoger ligt dan de

overgangstijden van de atomen. Uiteraard mag de frequentie  $\omega$  niet samenvallen met de resonantiefrequenties van de interne vrijheidsgraden van de atomen. Hierdoor kan dissipatie verwaarloosd worden en kan  $\alpha$  reëel beschouwd worden. Een plaatsafhankelijk stralingsveld [5.2] doet de potentiaal [5.4] resulteren in een kracht

$$\mathbf{f} = \frac{\alpha(\omega)}{2} \nabla \overline{E^2(\mathbf{r}, t)} \quad (5.5)$$

waaraan de atomen onderhevig zijn. Of de atomen aangetrokken of afgestoten worden door een sterk elektrisch veld wordt bepaald door het teken van  $\alpha(\omega)$ , dat op diens beurt weer afhankelijk is van het verschil tussen de frequentie van het laserveld  $\omega$  en de resonantiefrequentie  $\omega_R$  (de detuning). Voor positieve (blauwe) detuning wordt het elektrisch veld repulsief, voor negatieve (rode) detuning wordt het elektrisch veld attractief.

In het geval van een enkele laserstraal in de  $z$ -richting die wordt teruggekaatst krijgt het elektrisch veld [5.2] de vorm van een staande golf van de vorm

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E \cos(qz) e^{-i\omega t} + \text{h.c.}, \quad (5.6)$$

dewelke correspondeert met een effectieve potentiaal [5.4]

$$U(\mathbf{r}) = -\alpha(\omega) E^2 \cos^2(qz). \quad (5.7)$$

## 5.2 BRAGG-SPECTROSCOPIE

Beschouw nu twee verschillende lasers met frequenties  $\Omega \pm \omega/2$  en golfvectoren  $\mathbf{K} \pm \mathbf{q}/2$ . De intensiteiten worden gelijk beschouwd. Het gecombineerde elektrische veld heeft dan de vorm

$$\begin{aligned} E(\mathbf{r}, t) = \frac{E_0}{2} & \left( \cos \left[ \left( \mathbf{K} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \cdot \mathbf{r} - \left( \Omega + \frac{\omega}{2} \right) t \right] \right. \\ & \left. + \cos \left[ \left( \mathbf{K} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) \cdot \mathbf{r} - \left( \Omega - \frac{\omega}{2} \right) t \right] \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Hieruit volgt, met behulp van elementaire goniometrie, dat

$$E(\mathbf{r}, t)^2 = E_0^2 \cos^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \Omega t) \cos^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}/2 - \omega t/2). \quad (5.9)$$

Aangezien de frequentie  $\omega$  typisch zeer groot is in verhouding tot de frequenties die de atoombewegingen karakteriseren, kan  $\cos^2(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$  vervangen worden door de gemiddelde waarde  $1/2$ . Hieruit volgt, in analogie met (5.4), een effectieve potentiaal

$$U(\mathbf{r}, t) = -\alpha(\Omega) \frac{E_0^2}{4} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t). \quad (5.10)$$

Het sommeren over alle atomen resulteert in een Bragg-Hamiltoniaan

$$\hat{H}_B = \frac{1}{2} V_0 (\delta \hat{\rho}_q^\dagger e^{-i\omega t} + \delta \hat{\rho}_q e^{i\omega t}). \quad (5.11)$$



De dichtheidsfluctuatie-operator  $\delta\hat{\rho}_q$  staat voor de veranderingen van de  $q$ -component van de dichtheidsoperator  $\hat{\rho}$  in golfvectorrepresentatie. Deze kan geschreven worden als

$$\delta\hat{\rho}_q^\dagger = \sum_{n,m=0}^{M-1} I_q^{n-m} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n e^{iqma} \quad (5.12)$$

waarin  $I_q^n = \int dx e^{iqx} \phi_0(x) \phi_0(x - dn)$  en  $\phi_0(x)$  Wannier-functies zijn en  $a$  de roosterconstante [38]. De creatie-operator  $\hat{a}_m^\dagger$  creëert een deeltje in toestand  $m$  en de annihilatie-operator  $\hat{a}_n$  annihilieert een deeltje in toestand  $n$ . We zullen hier werken in de tight-bindingbenadering, die overeenkomt met diepe roosters en waar  $I_q^n \propto \delta_{n,0}$ . In de tight-bindingbenadering wordt de bragghamiltoniaan in tweede kwantisatie dus gegeven door

$$\begin{aligned} \hat{H}_B &= \sum_x V_0 \cos(qx - \omega t) \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \\ &= \frac{V_0}{2N} \sum_{k,k'} \sum_x \left[ e^{-i\omega t + i(q-k+k')x} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right. \\ &\quad \left. + e^{i\omega t + i(-q-k+k')x} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} \right] \\ &= \frac{V_0}{2} \sum_k \left[ e^{-i\omega t} \hat{a}_{k+q}^\dagger \hat{a}_k + e^{i\omega t} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k+q} \right]. \end{aligned} \quad (5.13)$$

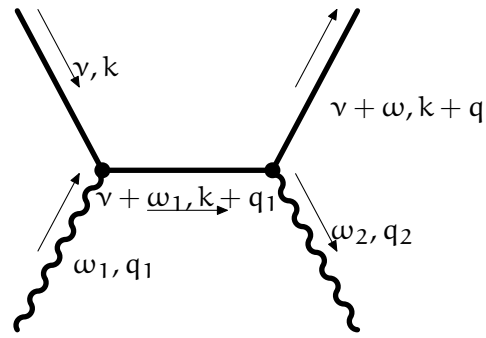
Merk op hoe de vorm van deze laatste uitdrukking (5.13) overeenkomt met (5.11).

In de afleiding van (5.13) werd gebruik gemaakt van de fourier-relaties tussen creatie-operatoren in reële en fourierruimte van de vorm [16]

$$\begin{cases} \hat{a}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} \hat{c}_j^\dagger & (5.14) \\ \hat{c}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} \hat{a}_k^\dagger. & (5.15) \end{cases}$$

De corresponderende relaties voor annihilatie-operatoren worden bekomen via hermitisch toevoegen. Verder werd nog gebruik gemaakt van  $\delta_{ll'} = \frac{1}{N} \sum_x e^{i(l-l')x}$ .

De fysica die correspondeert met de bragghamiltoniaan (5.13) is de volgende (zie figuur 5.1): de eerste term is in staat deeltjes met initieel vierimpuls  $(\nu, k)$  naar een toestand  $(\nu + \omega, k + q)$  te brengen en de tweede term om omgekeerd toestanden  $(\nu + \omega, k + q)$  naar een toestand  $(\nu, k)$  te brengen. Omdat de stabiele toestand na bragg-interactie moet voldoen aan de dispersierelatie besproken in hoofdstuk 6. Door  $\omega$  en  $q$  onafhankelijk te kiezen kan dan een specifieke overgang gekozen worden. Aangezien deze twee parameters  $\omega$  en  $q$  onafhankelijk moeten gekozen worden is er sprake van een twee-foton-proces.



Figuur 5.1: Laagste-orde feynmandiagram bij bragg spectroscopie: een fermion met vierimpuls  $(\nu, k)$  absorbeert eerst een foton  $(\omega_1, q_1)$  en zendt vervolgens een ander foton  $(\omega_2, q_2)$  uit. De impuls van het fermion is nu gewijzigd met  $(\omega = \omega_1 - \omega_2, q = q_1 - q_2)$

### 5.3 TOEPASSINGEN

Zowel optische potentialen als Bragg-spectroscopie kunnen gebruikt worden voor Bose-Einsteincondensaten, de optische potentiaal kan dan een alternatief bieden voor een magnetische val om het condensaat op te sluiten. Bragg-verstrooiing wordt dan ook typisch uitgevoerd op koude gassen in een optisch rooster. Meting van de responsfunctie kan dan informatie opleveren over bijvoorbeeld de temperatuur. Een belangrijk voorwerp van onderzoek in deze context is bijvoorbeeld de fase-overgang tussen een superfluïde regime en een Mott-isolator als functie van de roosterdiepte [1, 23, 26, 38, 53].

Deel II

METHODE



## SET-UP

## 6.1 SET-UP

Het fysische systeem in kwestie is een ééndimensionale keten met lengte  $L$  en bestaat uit spinloze fermionen<sup>1</sup>. Dit houdt in dat elke mogelijke eendeeltjes-impulstoestand steeds door 0 of 1 fermion bezet is. Er wordt uitgegaan van periodische randvoorwaarden. Wegens de eindige systeemgrootte wordt een basis in de fourierruimte gevormd door de ééndeeltjestoestanden  $|\psi_k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} = \hat{a}_k^\dagger |0\rangle$ , met  $k$  een veelvoud van  $\frac{2\pi}{L}$ .

In eerste instantie wordt een vrij fermionengas bestudeerd. Alle toestanden  $|\psi_x\rangle$ ,  $0 \leq x \leq L$  in reële ruimte zijn toegestaan en orthogonaal, met als gevolg dat het golfgetal  $k$  onbegrensd is en alle discrete toestanden  $|\psi_k\rangle$  met

$$k = n \frac{2\pi}{L}, n \in \mathbb{Z} \quad (6.1)$$

toegestaan zijn. De dispersierelatie van het vrij fermionengas wordt gegeven door

$$\epsilon_k = \alpha k^2, \quad (6.2)$$

waarbij  $\alpha$  kan geïdentificeerd worden als  $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_f}$ , gerelateerd aan de massa van het fermion. Dit correspondeert met een hamiltoniaan

$$H_{\text{gas}} = \alpha \sum_k k^2 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (6.3)$$

Het is mogelijk eenheden te kiezen waar  $\alpha = 1$ .

Naast dit fermionengas wordt ook een tight-bindingrooster bestudeerd. Dit systeem heeft per definitie in de reële ruimte een hamiltoniaan

$$H_{\text{tb}} = -\tau \sum_j \left( \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.} \right), \quad (6.4)$$

<sup>1</sup> Deeltjes die de anticommutatierelaties van fermionen gehoorzamen, maar geen spinvrijheidsgraad bezitten. Volgens de gangbare fundamentele modellen bestaan deze uiteraard niet. Omdat het verband tussen commutatierelaties en spin enkel gegeven wordt door het spin-statistiek theorema uit de relativistische kwantumveldentheorie [52], blijft het echter mogelijk te werken met een consistente theorie van spinloze fermionen zolang niet geëist wordt dat deze theorie Lorentzinvariant is.

waar  $\tau$  de *hoppingparameter* wordt genoemd. De index  $j$  labelt de toegestane positietoestanden van links naar rechts. Wordt als lengteschaal de roosterparameter  $a = 1$  gekozen, dan is  $j$  de fysieke positie en loopt de sommatie in (6.4) over alle gehele getallen waarvoor  $1 \leq j \leq L$ .

Gebruik van de relaties (5.14) levert, met  $N=L$ , in fourierruimte een hamiltoniaan op van de vorm

$$H_{\text{tb}} = -\tau \sum_{j=1}^L \left[ \frac{1}{L} \sum_k \left( e^{ik} e^{ikj} \hat{a}_k^\dagger \right) \sum_{k'} \left( e^{-ik'j} \hat{a}_{k'} \right) + \text{h.c.} \right] \quad (6.5)$$

$$= \frac{-\tau}{N} \sum_{k,k'} \left( e^{ik} N \delta_{k,k'} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{k'} + \text{h.c.} \right) \quad (6.6)$$

$$= -2\tau \sum_k \cos(k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (6.7)$$

Deze hamiltoniaan correspondeert met een dispersierelatie

$$\epsilon_k = -2\tau \cos k. \quad (6.8)$$

Een discreet rooster met roosterparameter  $a$  in reële ruimte correspondeert met een periodiciteit voor  $k$  in fourierruimte, met brillouinzones met grootte  $\frac{2\pi}{a}$ . Wegens de keuze van lengteschaal  $a = 1$  kan de eerste brillouinzone dus bijvoorbeeld voorgesteld worden met basisvectoren  $|\psi_k\rangle$  waar

$$k = n \frac{2\pi}{L}, \quad 0 \leq n < L. \quad (6.9)$$

In zowel het geval van het vrij elektronengas als het tight-bindingrooster wordt voor de Bragg-hamiltoniaan (5.13) genomen. Deze hamiltoniaan beschrijft de uitwisseling van energie  $\Delta\epsilon$  en impuls  $q$  met het systeem.

Het in deze opzet niet in eerste instantie de bedoeling is een concreet fysisch systeem te benaderen; bovenstaande definities leggen het te onderzoeken systeem volledig vast. Atomen kunnen bijvoorbeeld zoals besproken in [hoofdstuk 5](#) worden opgesloten in een tight-bindingrooster en de corresponderende vorm van Bragg-spectroscopie ondergaan, maar deze beschikken typisch over meer interne vrijheidsgraden. Het is ook mogelijk dat andere systemen zich door deze opzet laten beschrijven.

## 6.2 GGE VAN HET SYSTEEM

In een Gibbs-ensemble waar slechts één lagrangemultiplicator  $\mu_1$  in rekening moet worden gebracht heeft de dichtheidsmatrix van het volledige systeem de vorm

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{Z_1} \exp \left( -\mu_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \right). \quad (6.10)$$

Zijn er ook slechts twee mogelijke toestanden, bezet of onbezet, dan is  $Z_1 = 1 + e^{-\mu_1}$ . De Von Neumann-entropie van dit ensemble bedraagt

$$S_1 = -\text{tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1] \quad (6.11)$$

$$= \ln(1 + e^{-\mu_1}) + \frac{\mu_1}{e^{\mu_1} + 1} \quad (6.12)$$

Een tweenniveausysteem kan dan worden geschreven als een tensor-product van de twee niveaus

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \quad (6.13)$$

$$= \frac{1}{Z} \exp[-\mu_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \mu_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2] \quad (6.14)$$

$$= \frac{1}{Z_1} \exp(-\mu_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1) \frac{1}{Z_2} \exp(-\mu_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \quad (6.15)$$

als de bezettingen van de niveaus niet gecorreleerd zijn. Dit komt ook overeen met een entropie

$$S(\hat{\rho}) = S(\hat{\rho}_1) + S(\hat{\rho}_2) \quad (6.16)$$

$$= \ln(1 + e^{-\mu_1}) + \frac{\mu_1}{e^{\mu_1} + 1} + \ln(1 + e^{-\mu_2}) + \frac{\mu_2}{e^{\mu_2} + 1} \quad (6.17)$$

Wat overeen komt met de Shannon-entropie van de 4 mogelijke toestanden (0-0,0-1,1-0,1-1).

De fermionische keten waarvan sprake, bestaat uit  $L$  niveaus die zich elk in twee toestanden kunnen bevinden (bezet of onbezet) en deze keten moet dus beschreven worden in een  $2^L$ -dimensionale Hilbertruimte, met een toestand die in het algemeen niet separabel is. Worden correlaties echter verwaarloosd, kan de dichtheidsoperator van het volledige systeem worden geschreven als

$$\hat{\rho} = \bigotimes_{k=k_1}^{k_L} \hat{\rho}_k \quad (6.18)$$

dewelke overeenkomt met een totale entropie

$$S(\hat{\rho}) = \sum_{k=k_1}^{k_L} S(\hat{\rho}_k). \quad (6.19)$$

Expliciet kan (6.18) worden geschreven als

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp \left\{ - \sum_{k=k_1}^{k_L} \mu_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right\} \quad (6.20)$$

met  $Z = \prod_{k=k_1}^{k_L} Z_k$ . Dit is de vorm van een veralgemeend Gibbs-ensemble zoals besproken in [hoofdstuk 3](#). Het feit dat correlaties verwaarloosd werden heeft wel degelijk een kwantitatieve invloed op de resultaten [46], maar deze zouden het probleem veel gecompliceerder maken aangezien Wick's theorema niet meer bruikbaar is voor hogere orde correlaties.





De constructie van de unitaire transformatie (4.18) met Bragg-hamiltonianen van de vorm (5.13) is geen triviaal probleem. In onze aanpak wordt gefocust op het uitvoeren van de permutatie die de optimale sortering (4.15) bewerkstelligt. In sectie 7.1 wordt de eenvoudigst mogelijke permutatie bestudeerd: de verwisseling van de twee bezettingen in een tweenniveausysteem. In sectie 7.2 wordt aangetoond dat elke permutatie kan ontbonden worden in tweenniveau-verwisselingen. Volgens onze aanpak wordt de permutatie van bezettingen naar de optimale toestand dus gerealiseerd door een opeenvolging van unitaire verwisselingen, elk corresponderend met een andere hamiltoniaan (5.13) met gepaste parameters  $q$ ,  $\omega$ ,  $V_0$  en met een integratietijd  $T$ .

### 7.1 TWEENIVEAU-VERWISSELING

Om de tijdsevolutie van het systeem te bestuderen onder  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_B$  wordt in het Heisenbergbeeld gewerkt zodat de creatie- en annihilatieoperatoren evolueren in de tijd. Vanuit de vacuümtoestand kan hier achteraf dan steeds weer de gewenste toestand worden opgebouwd. De Heisenberg bewegingsvergelijkingen voor de annihilatieoperatoren bedragen:

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \hat{a}_k(t)}{\partial t} &= [\hat{a}_k(t), \hat{H}(t)] \\
 &= \sum_j \epsilon_j [\hat{a}_k, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j] + \frac{V_0 e^{-i\omega t}}{2} \sum_j [\hat{a}_k, \hat{a}_{j+q}^\dagger \hat{a}_j] \\
 &\quad + \frac{V_0 e^{+i\omega t}}{2} \sum_j [\hat{a}_k, \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+q}] \\
 &= \epsilon_k \hat{a}_k + \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} \hat{a}_{k-q} + \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} \hat{a}_{k+q}. \tag{7.1}
 \end{aligned}$$

Door hermitisch toevoegen kan hieruit ook de evolutie van de creatieoperatoren worden bekomen. De vergelijkingen van de vorm (7.1) vormen een stelsel van  $N$  gekoppelde lineaire differentiaalvergelijkingen met tijdsafhankelijke coëfficiënten voor een systeem met  $N$  toestanden. In de voorbeelden voor deze thesis is in principe  $N = \infty$  voor de kwadratische dispersie (6.2) en  $N = L$  bij tight-binding (6.8), maar bij de laatste situatie moet de periodiciteit in rekening worden gebracht.

In het eenvoudigste geval waar er slechts twee mogelijke ééndeeltjestoestanden  $k_1$  en  $k_2$  zijn waarin een gegeven deeltje zich kan bevinden, zonder periodiciteit en met respectievelijke energieniveaus  $\epsilon_1$

en  $\epsilon_2$ , herleidt het stelsel vergelijkingen (7.1) zich tot de matrixvergelijking

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} \\ \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Door de expliciete tijdsafhankelijkheid in het rechterlid kan de matrixvergelijking niet meteen opgelost worden. Daarom doen we een substitutie

$$\hat{a}_2 := e^{-i\nu t} \hat{a}_2 \text{ of } \hat{a}_2 = e^{i\nu t} \hat{a}_2 \quad (7.3)$$

met  $\nu$  nog te bepalen. Invullen van (7.3) in de bewegingsvergelijkingen (7.2) doet de expliciete tijdsafhankelijkheid verdwijnen voor  $\nu = \omega$ . De nieuwe vergelijkingen worden dan

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} & \epsilon_2 - \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2 \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

wat genoteerd kan worden als

$$i\dot{A} = MA. \quad (7.5)$$

Om dit stelsel op te lossen wordt getransformeerd naar een basis  $B$  waarin  $M$  diagonaal wordt. Dit geeft

$$i\dot{B} = DB \quad (7.6)$$

waarin

$$B = \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \end{pmatrix} = u^{-1} A \text{ of } A = uB \quad (7.7)$$

en

$$D = u^{-1} M u \quad (7.8)$$

met  $u$  een nog te bepalen unitaire operator.

De eerste eigenwaarde van  $M$  bedraagt, met  $\omega_{21} := \epsilon_2 - \epsilon_1$ ,

$$\lambda_- = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega - \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + V_0^2}}{2} \quad (7.9)$$

en deze correspondeert met een eigenvector

$$u_- = \left( -V_0, \omega - \omega_{21} + \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + V_0^2} \right)^T / \sqrt{N} \quad (7.10)$$

met normalisatieconstante

$$\mathcal{N} = 2V_0^2 + 2(\omega - \omega_{21})^2 + 2(\omega - \omega_{21})\sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + V_0^2}. \quad (7.11)$$

De tweede eigenwaarde van  $M$  bedraagt

$$\lambda_+ = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega + \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + V_0^2}}{2} \quad (7.12)$$

met bijbehorende eigenvector

$$\mathbf{u}_+ = \left( \omega - \omega_{21} + \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + V_0^2}, V_0 \right)^T / \sqrt{\mathcal{N}}. \quad (7.13)$$

Nu is  $D = \text{diag}(\lambda_-, \lambda_+)$  en  $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_-, \mathbf{u}_+)$ . Het is eenvoudig in te zien dat  $\mathbf{u}$  zowel unitair als hermitisch is zodat  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^\dagger = \mathbf{u}^{-1}$ .  $\mathbf{u}$  is niet speciaal (eenheidsdeterminant), maar  $-i\mathbf{u}$  wel. Indien gewenst zou deze SU-operator bekomen kunnen worden door in (7.6) de factor  $i$  naar het rechterlid te brengen. Dit is voor onze doeleinden echter niet nodig.

De oplossing van (7.6) wordt gegeven door

$$\begin{cases} \hat{b}_1(t) = \exp[-i\lambda_- t] \hat{b}_1(0) & (7.14) \\ \hat{b}_2(t) = \exp[-i\lambda_+ t] \hat{b}_2(0). & (7.15) \end{cases}$$

Gebruik van de transformaties (7.7) en (7.3) levert dan dt tijdsevolu-  
tie van de annihilatieoperatoren, deze voldoen ook aan de beginvoor-  
waarden  $\hat{a}_i(t=0) = \hat{a}_i(0)$ .

De waarschijnlijkheid om een deeltje in een gegeven toestand te vinden, is gerelateerd aan de teloperatoren  $\hat{N}_i(t) = \hat{a}_i^\dagger(t) \hat{a}_i(t)$ . De uitdrukking voor  $\hat{N}_2(t)$  is identiek aan die voor  $\hat{N}_1(t)$  met de coëfficiënten voor  $\hat{N}_1(0)$  en voor  $\hat{N}_2(0)$  gewisseld. De mengtermen veranderen bovendien van teken zodat  $\hat{N}_1(t) + \hat{N}_2(t) = \hat{N}_1(0) + \hat{N}_2(0)$ , het totaal aantal deeltjes, behouden blijft. De diagonaaltermen van de teloperator kunnen worden uitgedrukt met één enkele detuning-gerelateerde dimensieloze parameter  $x := \frac{\omega - \omega_{21}}{V_0}$  als

$$\begin{aligned} \hat{N}_1(V_0 t) &= \hat{N}_1(0) \frac{1 + (x + \sqrt{x^2 + 1})^4 + (x + \sqrt{x^2 + 1})^2 \left[ 2 - 4 \sin^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + 1}}{2} V_0 t \right) \right]}{[1 + (x + \sqrt{x^2 + 1})^2]^2} \\ &\quad + \hat{N}_2(0) \frac{(x + \sqrt{x^2 + 1})^2 4 \sin^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + 1}}{2} V_0 t \right)}{[1 + (x + \sqrt{x^2 + 1})^2]^2} \\ &\quad + \text{offdiagonaaltermen} \\ &= \hat{N}_1(0) \left( 1 - \frac{\sin^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + 1}}{2} V_0 t \right)}{x^2 + 1} \right) + \hat{N}_2(0) \frac{\sin^2 \left( \frac{\sqrt{x^2 + 1}}{2} V_0 t \right)}{x^2 + 1} + \text{odt} \end{aligned} \quad (7.16)$$

Analoog is ook

$$\hat{N}_2(V_0 t) = \hat{N}_1(0) \frac{\sin^2\left(\frac{\sqrt{x^2+1}}{2} V_0 t\right)}{x^2+1} + \hat{N}_2(0) \left(1 - \frac{\sin^2\left(\frac{\sqrt{x^2+1}}{2} V_0 t\right)}{x^2+1}\right) + \text{odt.} \quad (7.17)$$

Dit resultaat correspondeert met het concept van Rabi-oscillaties zoals beschreven in [44] met de identificatie  $\gamma = \frac{V_0}{2}$  en waar in het Schrödingerbeeld en eerste kwantisatie gewerkt werd.

In het bijzonder blijkt uit vergelijkingen (7.16), (7.17) dat enkel op resonantie  $x = 0$  de verwisseling volledig kan plaatsvinden en afneemt volgens toenemende  $|x|$ . Ook de hoekfrequentie  $\Omega$  van de oscillatie is  $x$ -afhankelijk: er geldt

$$\Omega = \frac{\sqrt{x^2+1}}{2} V_0 \quad (7.18)$$

zodat de periode

$$T_{\text{per}} = \frac{2\pi}{\Omega} = \frac{4\pi}{V_0 \sqrt{x^2+1}} \quad (7.19)$$

en de tijd voor de optimale wisseling bedraagt

$$T_{\text{wissel}} = T_{\text{per}}/2 = \frac{2\pi}{V_0 \sqrt{x^2+1}}. \quad (7.20)$$

Om de bezettingen van twee niveaus volledig te verwisselen is het dus aangewezen de resonantiefrequentie  $\omega = \omega_{21}$  te kiezen met  $V_0 T = 2\pi$ . Bevat het systeem ook nog andere niveaus, dan zal simultaan met de gewenste niveaus nog een oscillatie bestaan tussen elk ander paar niveaus  $\epsilon_k$  en  $\epsilon_{k'}$  wanneer  $k + q = k'$ . Deze overige oscillaties hebben een andere periode en worden daarnaast onderdrukt volgens toenemende  $|x|$ . Het valt dus te verwachten dat het meest selectief de juiste overgang kan gekozen worden voor kleine  $V_0$ , wat correspondeert met grote  $|x|$ . Ook  $T$  wordt groot op die manier: de traagste overgangen zullen dus waarschijnlijk de zuiverste zijn.

## 7.2 PERMUTATIE-ONTBINDING

In deze sectie wordt een algoritme opgesteld om de bezettingen van de energieniveaus te sorteren zodat een hoger energieniveau telkens een lagere bezetting kent. Hiertoe worden enkele resultaten uit groepentheorie aangewend in verband met de permutatiegroep [15]:

**stelling 1** *Gegeven een permutatie  $\pi$  op een verzameling letters  $S$ . Dan kan  $S$  verdeeld worden in disjuncte deelverzamelingen zodat  $\pi$  een cykel vormt op elke deelverzameling van  $S$ .*

Hieruit volgt dat elke permutatie van energieniveaus kan geschreven worden als een aantal losse cyclische rotaties (*cykels*). Een cykel van lengte twee, dus met twee elementen, noemt men een *verwisseling*.

**stelling 2** *Elke cykel van lengte  $n$  is het product van  $n - 1$  verwisselingen, immers*

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) = (x_1, x_n) \dots (x_1, x_3)(x_1, x_2) \quad (7.21)$$

Volgens de gebruikte conventie wordt binnen elke cykel elk element op het element net rechts ervan afgebeeld en worden de verschillende cykels in een product van rechts naar links uitgevoerd, zoals de gebruikelijke volgorde van operatoren in de fysica. Het gevolg van bovenstaande stelling dat alle cyclische permutaties (rotaties) kunnen uitgevoerd worden door opeenvolging van een eindig aantal tweeniveau-verwisselingen. Uit de combinatie van bovenstaande twee stellingen volgt dan dat tweeniveau-verwisselingen voldoende zijn om elke permutatie te construeren. De ontbinding in stelling 2 is slechts één methode om een cykel te ontbinden, maar er zijn in het algemeen een groot aantal verschillende manieren waarop een cykel kan geschreven worden als een product van verwisselingen. Het is wel zo dat voor een gegeven cykel het aantal verwisselingen in een ontbinding ofwel telkens even is, ofwel altijd oneven (de pariteit van de cykel). In onze opzet is het gewenst de permutatie uit te voeren door middel van zo weinig mogelijk verwisselingen<sup>1</sup>, om verschillende redenen. Ten eerste moeten voor elke verwisseling de Bragg-parameters worden aangepast en zal het aantal experimentele configuraties dus toenemen met het aantal verwisselingen. Ten tweede bepaalt het aantal verwisselingen in grote mate de tijd nodig om de totale operatie uit te voeren en ten derde zal elke verwisseling ook een fout met zich meebrengen, terwijl het gewenst is dat de totale fout zo klein mogelijk blijft. Wel moeten binnen een cykel alle elementen in verbinding staan, anders zou deze cykel uiteenvallen in meerdere (disjuncte) delen. Om deze reden kan een cykel van lengte  $n$  niet geschreven worden als een product van minder dan  $n - 1$  verwisselingen. Het feit dat alle elementen met elkaar in verbinding moeten staan via verwisselingen kan immers voorgesteld worden als een graaf met elk energieniveau een knoop en elke verwisseling een pad. De cyclische permutatie met zo weinig mogelijk verwisselingen wordt dan een verbonden graaf met zo weinig mogelijk verbindingen

<sup>1</sup> In de informatica is ook grondige studie gedaan naar sorteeralgoritmes [54], maar het doel is daar in het algemeen verschillend van deze situatie. Waar in deze thesis de interesse ligt bij een algoritme met een zo klein mogelijk aantal verwisselingen corresponderend met fysieke operaties, is het voor computationeel sorteren belangrijk zo weinig mogelijk getallen te hoeven vergelijken.

en dit is een boomgraaf (er is maar één enkel pad mogelijk tussen elke twee knopen). Volgende stelling uit grafentheorie [56] kan dan gebruikt worden:

**stelling 3** Een verbonden graaf  $G$  met  $p$  hoekpunten vormt een boomgraaf als en slechts als  $G$   $p - 1$  verbindingen heeft.

Dit houdt in dat met minder dan  $n - 1$  verwisselingen nooit de volledige cykel kan worden gerealiseerd.

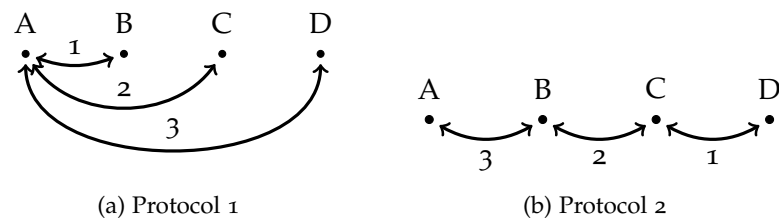
In het algemeen zijn er wel nog een aantal verschillende manieren om cyclen van lengte  $n$  te schrijven als het product van  $n - 1$  verwisselingen. Dit is in te zien door ze uit te schrijven, zo geeft de ontbinding

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) = (x_1, x_2)(x_2, x_3) \dots (x_{n-1}, x_n) \quad (7.22)$$

hetzelfde resultaat als de ontbinding uit stelling 2. Een schematische weergave van beide protocols wordt gegeven op [figuur 7.1](#). Merk op dat er bij elk protocol nog eenvoudige gelijkaardige protocols zijn te construeren door in de notatie van een cykel alle elementen cyclisch te roteren. Dit resulteert voor het eerste protocol bijvoorbeeld in

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) = (x_2, \dots, x_n, x_1) = (x_2, x_1)(x_2, x_n) \dots (x_2, x_3) \quad (7.23)$$

en een gelijkaardige constructie is mogelijk bij protocol 2. We gaan op deze mogelijkheden echter niet dieper in.



Figuur 7.1: Schematische weergave van beide protocols. Het getal bij de pijl duidt op de volgorde waarop de operaties plaatsvinden.

## IMPLEMENTATIE

In dit hoofdstuk wordt conceptueel de uitwerking gegeven voor de verschillende hamiltonianen, samen met enkele mogelijke problemen en oplossingen. Vervolgens wordt de computationele implementatie uiteengezet.

## 8.1 VRIJ FERMIONGAS

## 8.1.1 Heisenbergvergelijkingen

In het geval van vele toestanden zoals het vrij fermiongas dient een groot aantal (in principe oneindig veel) vergelijkingen (7.1) opgelost te worden. Deze matrixvergelijkingen zijn in het algemeen niet exact oplosbaar en de oplossingen kunnen bijvoorbeeld benaderd worden door middel van van een Floquet-Magnus-expansie [43]. In dit geval is het echter mogelijk een veralgemening te doen van de substituties van het tweenniveausysteem (7.3). Het oorspronkelijke stelsel

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vdots \\ \hat{a}_{-1} \\ \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & \epsilon_{-1} & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & 0 & \dots \\ \dots & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_0 & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & \dots \\ \dots & 0 & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \hat{a}_{-1} \\ \hat{a}_0 \\ \hat{a}_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

dat van toepassing is voor  $k_n = nq$ , wordt vereenvoudigd door de substituties

$$\hat{a}_n := e^{-i\omega n t} \tilde{\hat{a}}_n \text{ of } \tilde{\hat{a}}_n = e^{i\omega n t} \hat{a}_n \quad (8.2)$$

tot

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vdots \\ \tilde{\hat{a}}_{-1} \\ \tilde{\hat{a}}_0 \\ \tilde{\hat{a}}_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & \tilde{\epsilon}_{-1} & \frac{V_0}{2} & 0 & \dots \\ \dots & \frac{V_0}{2} & \tilde{\epsilon}_0 & \frac{V_0}{2} & \dots \\ \dots & 0 & \frac{V_0}{2} & \tilde{\epsilon}_1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \tilde{\hat{a}}_{-1} \\ \tilde{\hat{a}}_0 \\ \tilde{\hat{a}}_1 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (8.3)$$





We verwaarlozen hier opnieuw de niet-diagonale toestanden aangezien deze oscilleren en dus na voldoende tijd wachten uitmiddelen tot nul. De tijdsevolutie van het systeem kan dan naar de tijdsevolutie van de lagrangemultiplicatoren worden vertaald als

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{Z} \exp \left\{ - \sum_k \mu_k(t) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right\}. \quad (8.12)$$

## 8.2 TIGHT-BINDINGGEVAL

In het tight-bindinggeval treedt een belangrijke complicatie op, met name de periodiciteit in  $k$ . Omdat  $k = k + 2\pi$  zal ook  $\epsilon_k = \epsilon_{k+2\pi}$  voldaan zijn. Maar het is eenvoudig in te zien dat de substituties (8.2) een  $\tilde{\epsilon}_k \neq \tilde{\epsilon}_{k+2\pi}$  veroorzaken. Daarnaast zal de oorspronkelijke evolutiematrix niet langer tridiagonaal zijn. Voor  $q = q_0 := 2\pi/L$ ,  $L = 5$  wordt deze bijvoorbeeld gegeven door

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{-2\pi/5} & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & 0 & 0 & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} \\ \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_{-\pi/5} & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_0 & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_{\pi/5} & \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} \\ \frac{V_0}{2} e^{i\omega t} & 0 & 0 & \frac{V_0}{2} e^{-i\omega t} & \epsilon_{2\pi/5} \end{pmatrix}. \quad (8.13)$$

Substituties (8.2) leveren een matrix

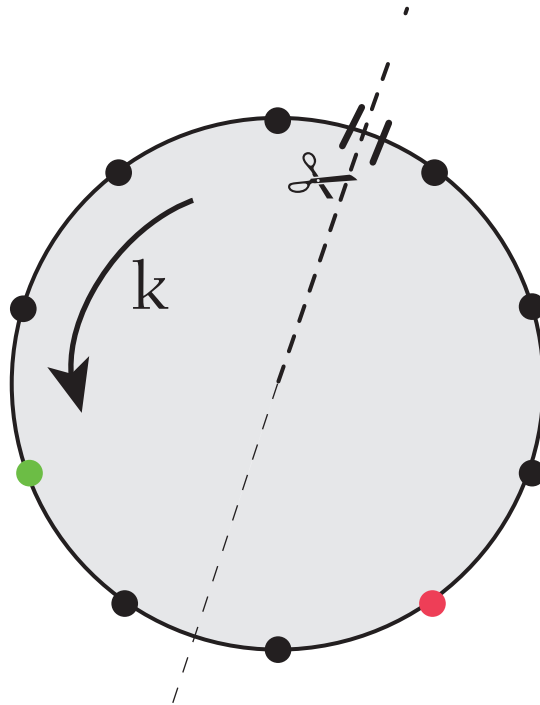
$$\begin{pmatrix} \epsilon_{-2\pi/5} + 2\omega & \frac{V_0}{2} & 0 & 0 & \frac{V_0}{2} e^{-5i\omega t} \\ \frac{V_0}{2} & \epsilon_{-\pi/5} + \omega & \frac{V_0}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{V_0}{2} & \epsilon_0 & \frac{V_0}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{V_0}{2} & \epsilon_{\pi/5} - \omega & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} e^{5i\omega t} & 0 & 0 & \frac{V_0}{2} & \epsilon_{2\pi/5} - 2\omega \end{pmatrix}, \quad (8.14)$$

de tijdsafhankelijkheid is dus niet weggewerkt. In het algemeen wordt de  $q/q_0$ -de diagonaal met  $V_0/2$  gevuld voor de gewone processen en de  $L - q/q_0$ -diagonaalelementen corresponderend met de Umklapp-processen, die oscilleren met frequentie  $L/(q/q_0)$ . Daar deze Umklapp-elementen de oplossing via diagonalisatie onmogelijk maken, verwaarlozen we deze in de analyse. Dit zou gemotiveerd kunnen worden door te stellen dat deze Umklapp-elementen op een veel snellere tijdschaal oscilleren dan de overgangen van het systeem kunnen plaatshebben en dus uitmiddelen tot nul. Dit is echter geen waterdicht argument aangezien de keuze van de Brillouinzone, en dus welke overgangen snel oscilleren, op dit punt nog arbitrair is.

Worden gewoon alle Umklapp-processen verwaarloosd, houdt dit in dat het antwoord op de vraag of een gegeven proces belangrijk

kan zijn afhankelijk is van de keuze van de Brillouinzone. Umklapp-processen zijn immers per definitie diegene die de rand van de Brillouinzone overschrijden, en voor elke overgang in  $k$  kan deze Brillouinzone zodanig gekozen worden dat het proces volledig hierbinnen plaatsvindt.

Om deze reden zullen we met elke tweenniveau-verwisseling de Brillouinzone dynamisch mee verschuiven zodat de twee  $k$ -toestanden waarvan de bezettingen verwisseld worden zich centraal in deze Brillouinzone bevinden (zie figuur [figuur 8.1](#)). Deze gewenste, resonante, verwisseling, gebeurt met grootste amplitude van alle verwisselingen en zal hoofdzakelijk gekoppeld zijn aan de naburige niveaus. Daarom wordt de rand van de Brillouinzone zover mogelijk van deze resonante overgang vandaan gekozen.



Figuur 8.1: De  $k$ -toestanden zijn in principe periodisch met periode  $2\pi/a$ , waardoor een enkele Brillouinzone alle informatie bevat. De Umklapp-processen, die de grens van de Brillouinzone overschrijden, kunnen volgens de gebruikte methode niet in rekening worden gebracht. Daarom wordt de grens van de Brillouinzone zover mogelijk gekozen van de te wisselen  $k$ -toestanden (groen en rood op de tekening).

### 8.2.1 Samenvallende resonanties

De waarschijnlijkheid dat twee willekeurige reële getallen exact gelijk zijn bedraagt nul. In het geval van onze dispersierelatie zijn de energverschillen echter niet willekeurig. Het is eenvoudig in te zien dat

in het kwadratische geval de transformatie (8.2) meerdere ontbindingen teweegbrengt, maar het verschil in  $k$  is overal verschillend, zodat de juiste keuze van  $q$  in combinatie met  $\omega$  een unieke resonante overgang bepaalt.

In het tight-bindinggeval daarentegen kan het wel voorkomen dat de voorwaarden voor resonantie  $k = k' + q$  en  $\tilde{\epsilon}_k = \tilde{\epsilon}_{k'}$  simultaan voldaan zijn, gerelateerd aan de vorm van de cosinusfunctie (zie figuur 8.2a). Het is dan niet mogelijk een enkele overgang te bewerkstelligen en alle overgangen zoveel mogelijk ongemoeid te laten. Om dit probleem te overkomen beschouwen we twee mogelijkheden:

1. Een Galileitransformatie  $k \rightarrow k + \delta k$  uitvoeren, met  $\delta k$  gelijk voor alle waarden van  $k$ . Hiermee veranderen de basistoestanden en zal bijvoorbeeld  $k = 0$  geen basistoestand meer zijn (zie figuur 8.2b). Expliciet worden de nieuwe basisvectoren gegeven door  $k_n = \frac{n\pi}{L} + \delta k$ . De Galileitransformatie kan in de praktijk worden gerealiseerd door het aanleggen van een kunstmatig ijkveld [10], dit naar analogie met de transformatie van het geconjugerd impuls van een geladen deeltje bij aanleggen van een magnetisch veld  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$  met  $\mathbf{A}$  de vectorpotentiaal.
2. Naast enkel nearest-neighbour-hopping aan de tightbindinghamiltoniaan een hogere-orde term toevoegen die next-nearest-neighbour-hopping voorstelt; deze term heeft de vorm

$$\hat{H}_{\text{nnn}} = -\sigma \sum_j \left( \hat{c}_{j+2}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.} \right) \quad (8.15)$$

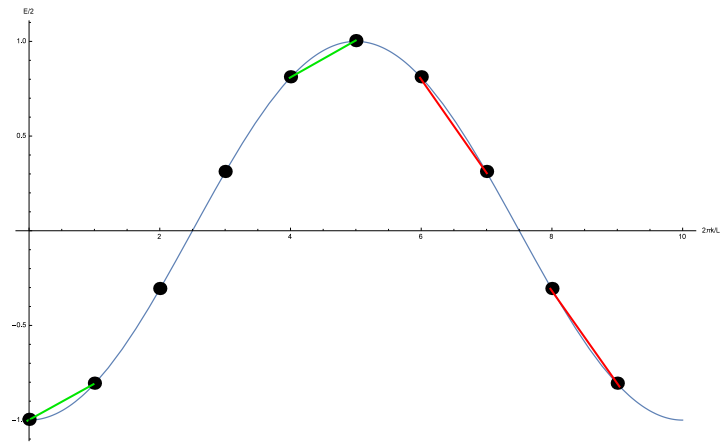
$$= -2\sigma \sum_k \cos(2k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (8.16)$$

waar opnieuw gebruik gemaakt werd van de relaties (5.14). Deze next-nearest-neighbourterm heeft een andere periode dan de nearest-neighbourterm zodat resonante overgangen geëlimineerd kunnen worden (figuur 8.2c).

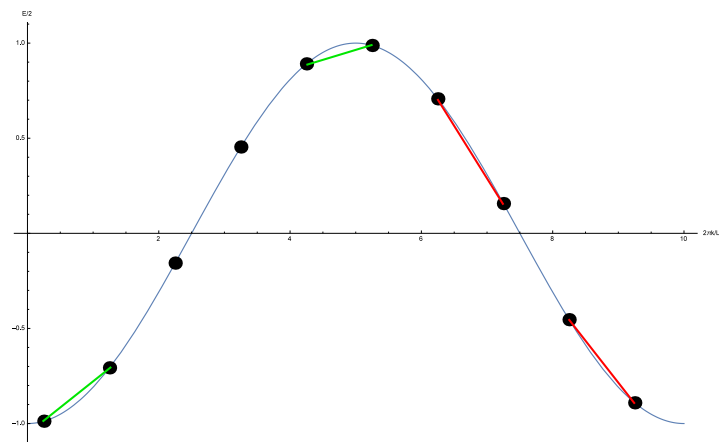
Combinatie van figuren figuur 8.1 en figuur 8.2 leert ook dat de umklapp-processen ook het dichtst bij resonantie komen wanneer de te wisselen toestanden een quasi-gelijke energie hebben, ook dit bijbehorende umklapp-proces heeft dan plaats tussen toestanden met bijna gelijke energie zodat deze processen nauwelijks invloed hebben op de onttrokken arbeid. Een entropiebijdrage blijft daarentegen wel mogelijk.

### 8.3 COMPUTATIONELE UITWERKING

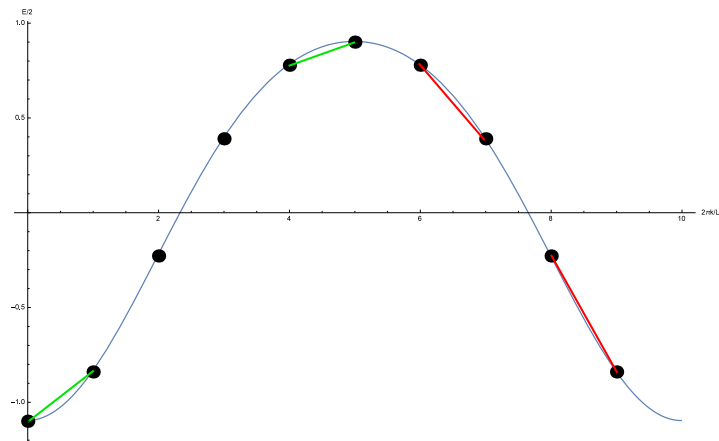
De berekeningen werden uitgevoerd in *Wolfram Mathematica 10.3*. Hieronder wordt de opbouw geschetst van het programma waarmee het



(a) Onverstoord



(b) Verschuiving



(c) met NNN-hopping

Figuur 8.2: (a) Wanneer  $k = 0$  een basistoestand vormt, zullen de resonantiecondities samenvallen, zoals hier weergegeven voor  $L = 10$ ,  $q = 2\pi/L$ . Zowel de twee overgangen in eenzelfde kleur verbonden hebben telkens een gelijke  $\Delta k$  en  $\Delta \epsilon_k$ . Dit is grafisch te zien doordat de verbindinglijnen parallel lopen. (b) Bij arbitraire verschuiving van de basistoestanden vallen de resonantiecondities niet langer samen. (c) Ook toevoeging van een next-nearest-neighbourterm doet de ontandingen verdwijnen.

onttrekken van arbeid werd uitgevoerd. Gegeven zijn een begintoestand, enerzijds bestaande uit een array met de energieniveaus  $\epsilon_k$  en anderzijds een array met de lagrangemultiplicatoren  $\mu_k^{\text{init}}$  of equivalent de eendeeltjesbezettingen  $\hat{\rho}_{kk}^{\text{init}}$ . Het aantal beschouwde energieniveaus is steeds eindig, in de afwezigheid van een rooster, zoals bij het vrij elektronengas, moet er dus een cutoff geïntroduceerd worden. De uitvoer bestaat uit dezelfde energieniveaus  $\epsilon_k$  samen met de nieuwe eindtoestand  $\mu_k^{\text{final}}$  of  $\hat{\rho}_{kk}^{\text{final}}$ . Of met de lagrangemultiplicatoren of met de ééndeeltjesbezettingen wordt gewerkt, de één-op-één correspondentie tussen beide blijft behouden, en beide worden ook wiskundig op dezelfde manier behandeld, enkel de numerieke waarden verschillen (dit werd geverifieerd).

Het programma is opgebouwd uit de geneste functies `wissel`, `shiftedwissel`, `toTranspositions`, `OrderingToTarget` en `sorteringper/sorteringaper`.

### 8.3.1 De functie *wissel*

De functie `wissel` zal, voor een gegeven brillouinzone en twee gekozen niveaus  $n$  en  $m$ , de unitaire operatie opstellen die de bezettingen van deze niveaus omwisselt en deze operatie ook uitvoeren

- 1 `wissel[{ $\epsilon_k, \mu_k$ }, n, m] :=`  
 voer symbolische variabele  $\omega$  in, definieer  $\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - k\omega$   
 Bereken numeriek  $\omega$  waarvoor  $\tilde{\epsilon}_n = \tilde{\epsilon}_m$  en substitueer.  
 Bereken het nummer van de te bezetten nevendiagonaal als  $\text{bnr} = |n - m|$ .  
 Construeer de hamiltoniaan  $H_{\text{int}}$  met diagonaalelementen  $\epsilon_k$  en  $V_0/2$  op de  $\text{bnr}$ -de nevendiagonalen.
- 6 Bereken matrix van eigenvectoren  $V$  van  $H_{\text{int}}$ , diagonaliseer  $H_{\text{int}}$  tot  $D_{\text{int}}$ .  
 Bereken  $M = \text{MatrixExp}[iD_{\text{int}}T]$ .  
 Transformeer  $M$  terug naar  $k$ -ruimte mbv  $V$  tot de unitaire tijdsevolutie-operator  $U$ .  
 Bereken de matrixvermenigvuldiging  $U^\dagger \mu^{\text{init}} U = \mu^{\text{final}}$  de diagonaalelementen van  $\mu_k^{\text{final}}$ , geven de nieuwe multiplicatoren.
- 11 Uitvoerargumenten zijn  $\{\epsilon_k, \mu_k^{\text{final}}\}$ .

Op regel 2 werd er gebruik gemaakt van het feit dat totale energie slechts bepaald is tot een additieve constante, daarom maakt het niet uit waar  $k$  begint te tellen.

### 8.3.2 De functie *shiftedwissel*

De functie `shiftedwissel` zal binnen een initiële keuze van brillouinzone en twee gekozen niveaus  $n$  en  $m$  de nieuwe brillouinzone construeren met grenzen zover mogelijk van de te wisselen niveaus en de energieniveaus, bezettingen en te wisselen niveaus uitdrukken in deze nieuwe brillouinzone. Deze getransformeerde parameters worden dan doorgegeven aan de functie `wissel`.

```

shiftedwissel[{\epsilon_k, \mu_k}, n, m] :=
Controleer dat aantal toestanden en aantal bezettingen gelijk
zijn en noem dit getal L.
Bereken het verschil diff= n - m mod L.
4 Voor oneven diff: \tilde{n} := \frac{L+1-diff}{2}; \tilde{m} := \frac{L+1+diff}{2}
Voor even diff: \tilde{n} := \frac{L-diff}{2}; \tilde{m} := \frac{L+diff}{2}.
Bereken hoever er moet verschoven worden als shift := \tilde{n} - n mod L.
Roteer de elementen van de vector {\epsilon_k, \mu_k} shift plaatsen naar
rechts, roep de functie wissel aan met de geroteerde vectoren
en de niveaus \tilde{n} en \tilde{m}.
Roteer de uitvoerargumenten van wissel opnieuw shift plaatsen
naar links.

```

### 8.3.3 De functies toTranspositions1 en toTranspositions2

Deze functies doen de cykelontbinding van de permutatie in tweenniveau-verwisselingen. toTranspositions1 doet de ontbinding volgens het protocol beschreven in (2) en toTranspositions2 doet deze volgens het protocol (7.22). De verwisselingen worden gerangschikt zoals operatoren gewoonlijk worden gerangschikt: de meest rechtse verwisseling moet eerst worden uitgevoerd.

### 8.3.4 De functie orderingToTarget

De functie orderingToTarget[list1, list2], gebaseerd op [59], sorteert de elementen van een gegeven list1 zodat deze op dezelfde manier gerangschikt staan als die van een andere gegeven list2. In de praktijk zal deze functie aangewend worden om de optimale sortering te bewerkstelligen door te zorgen dat de bezettingen de omgekeerde sortering hebben als de energieniveaus (dus lagrangemultipliatoren dezelfde sortering als de energieniveaus).

### 8.3.5 De functies sorteringper/sorteringaper

De functies sorteringper/sorteringaper zijn de functies die in eerste lijn worden aangeroepen om de unitaire sortering van energieniveaus te bewerkstelligen voor respectievelijk systemen met en zonder periodiciteit in k-ruimte.

```

sortering(a)per[{\epsilon_k}, {\mu_k}] :=
2 Bepaal de optimale sortering optimalsort=orderingToTarget[
{\mu_k}, {\epsilon_k}]. (Wanneer expliciet met bezettingen gewerkt wordt,
geeft dit optimalsort=orderingToTarget[{\rho_{kk}}, {-\epsilon_k}].)
Bereken de permutatie perm van de huidige lijst {\mu_k} naar
optimalstate.
Druk perm uit in een reeks tweenniveau-verwisselingen verw met
behulp van toTranspositions.

```

Laat op elke verwisseling van niveaus  $n$  en  $m$  een shiftedwissel (voor sorteringper) of wissel (in het geval van sorteringaper) inwerken (met argumenten voor energieniveaus en bezettingen nog open), zodat voor deze verwisseling een specifieke functie  $f_{nm}$  geconstrueerd wordt.

Werk overtollige niveaus weg en construeer de functiecompositie

$$F := \dots \circ f_{n_2 m_2} \circ f_{n_1 m_1}.$$

- 7 Laat  $F$  inwerken op de begintoestand om de finale toestand te bekomen.





## QUENCHING

---

In dit hoofdstuk wordt aangetoond hoe een initiële toestand voor de fermionische keten bereid kan worden die zich niet in de grondtoestand bevindt, vertrekkend vanuit een systeem dat zich wel in de grondtoestand bevindt. De voorgestelde methode bestaat uit *kwantumquenching*, waarbij de hamiltoniaan instantaan een eindige verandering ondergaat.

### 9.1 TIJDSEVOLUTIE EN KWANTUMQUENCHES

Een gevolg van het feit dat de norm van de toestand van een gesloten kwantumsysteem bewaard blijft, is dat tijdsevolutie steeds unitair verloopt [44], waardoor het spectrum van de dichtheidsoperator behouden blijft. In de adiabatische limiet zal een toestand die initieel diagonaal is in de energiebasis dan ook evolueren naar een finale toestand met een dichtheidsmatrix die dezelfde componenten heeft als deze wordt uitgedrukt in de nieuwe energiebasis (en dus opnieuw diagonaal is). Dit komt omdat de tijdsevolutie van het systeem samenvalt met de unitaire transformatie tussen de oude en de nieuwe energiebasis.

Er is echter ook een andere limiet, waarin de hamiltoniaan instantaan op  $t = t_Q$  verandert: een zogeheten kwantumquench [36]. In dat geval kan er geen tijdsevolutie plaatsvinden binnen het infinitesimale tijdsinterval  $[t_Q - \delta t, t_Q + \delta t]$ , hoewel deze quench wel met een basisovergang gepaard gaat tussen de oude en de nieuwe energiebasis. Het effect van deze quench is dus dat de oude dichtheidsoperator wordt uitgedrukt in de nieuwe energiebasis, wat resulteert in een dichtheidsmatrix die niet langer diagonaal is. De diagonaalelementen van de dichtheidsmatrix zijn opnieuw stationair, terwijl de offdiagonaalelementen oscilleren zoals beschreven in [sectie 3.1.2.2](#). Tijdsuitmiddeling of verlies van informatie over de precieze tijd doet de offdiagonaalelementen dan ook verdwijnen waardoor er opnieuw een diagonale toestand in de energiebasis overblijft. Het spectrum van deze finale toestand wijzigt daardoor ten opzichte van het spectrum van de toestand vóór de quench. Een quench van een systeem in de grondtoestand zal dan ook een nieuw systeem opleveren dat zich in het algemeen niet meer in de nieuwe grondtoestand bevindt.

## 9.2 QUENCHING VAN EEN FERMIONISCHE KETEN

Een intensief bestudeerd voorbeeld van kwantumquenching is het instantaan inschakelen van een additionele periodische potentiaal bij een lineaire keten [42, 45, 46]. Deze potentiaal kan bijvoorbeeld opnieuw van optische aard zijn. De potentiaal treedt op als bijkomende term in de hamiltoniaan van de vorm

$$J \sum_{j=1}^L \cos\left(\frac{2\pi j}{\lambda}\right) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j. \quad (9.1)$$

Deze term wordt gekarakteriseerd door de twee parameters  $\lambda$  en  $J$ .  $\lambda$  is de periode van de bijkomende potentiaal en om te voldoen aan de randvoorwaarden moet deze commensurabel zijn met  $L$ , dit wil zeggen  $L/\lambda \in \mathbb{N}_0$ . De parameter  $J$  bepaalt de intensiteit van de potentiaal oftewel de sterkte van de quench.

Er zijn echter twee praktische bezwaren tegen het gebruik van quenching door middel van het aanzetten van een additionele potentiaal van de vorm (9.1). Ten eerste is het golfgetal  $k$  met de periodische term niet langer een goed kwantumgetal om de energie-eigentoestanden te karakteriseren. Ten tweede convergeren voor hoge  $J$  alle eigenwaarden naar  $\lambda$ -aantal banden, zoals weergegeven op [figuur 9.1](#). Voor het opzet van deze thesis is het daarentegen de bedoeling een groot aantal verschillende energieniveaus te hebben. Om deze redenen opteren we voor de omgekeerde quench: vanuit een tight-bindingrooster initieel in de grondtoestand wordt adiabatisch de periodische potentiaal aangezet door continu  $J$  te laten toenemen vertrekkende vanuit  $J = 0$  tot een eindige waarde. Dit resulteert in een systeem in de grondtoestand van

$$\hat{H}_{-1} = - \sum \tau(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.}) + J \sum_j \cos\left(\frac{2\pi j}{\lambda}\right) \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j. \quad (9.2)$$

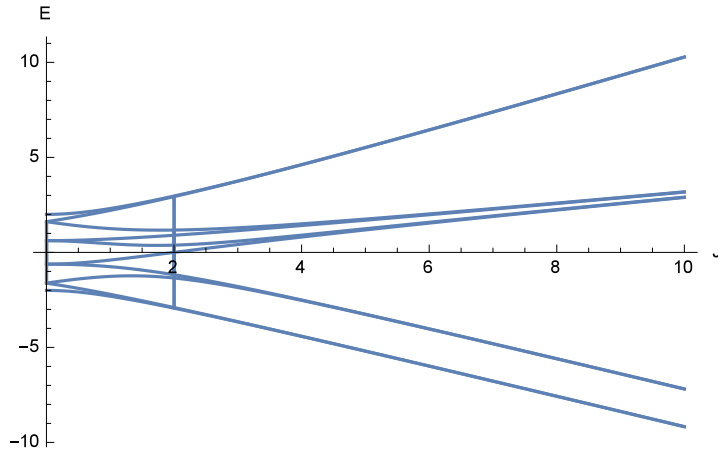
De quenching vindt dan plaats door instantaan  $J = 0$  te stellen, d.i. de potentiaal wordt uitgeschakeld. De hamiltoniaan van de resulterende toestand is dan opnieuw

$$\hat{H}_0 = - \sum \tau(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \text{h.c.}). \quad (9.3)$$

dewelke diagonaal is in de  $k$ -basis. We zullen vanaf nu naar de quench door het inschakelen van de externe potentiaal verwijzen als de ‘voorwaartse’ quench, en naar de quench voor het uitschakelen van de externe potentiaal als de ‘achterwaartse quench’.

## 9.3 COMPUTATIONELE UITWERKING VAN DE QUENCHES

Beide quenches (aan- en uitschakelen van de periodieke potentiaal) werden zowel uitgevoerd in de positiebasis als in de fourierbasis om



Figuur 9.1: Het eigenwaardenspectrum van de hamiltoniaan als functie van  $J$ , met  $\tau = 1$ ,  $\lambda = 5$  en  $L = 10$ . Het is duidelijk dat voor hoge waarden van  $J$  het spectrum zich in  $\lambda = 5$  banden opdeelt, dit is ook het geval voor hogere waarden van  $L$ . De asymmetrie van het spectrum is een gevolg van de keuze van fase in de cosinusfunctie uit reële ruimte: een verschuiving van de periodische potentiaal kan bijvoorbeeld ook een spectrum opwekken met drie negatieve banden. De verticale lijn rond  $J = 2$  is louter een numeriek gevolg door het veranderen van de volgorde waarin de eigenwaarden berekend worden, dit toont aan dat voorzichtigheid geboden is met de correspondentie tussen toestanden bij verschillende  $k$ .

de correctheid van de resultaten te verifiëren, zodat in totaal vier combinaties moeten worden bestudeerd met een gelijkaardig algoritme. Er werd steeds vertrokken vanuit een initiële toestand bij temperatuur  $T = 0$  en halve bezetting. Deze situatie correspondeert met een initiële eendeeltjesdichtheidsmatrix van de vorm

$$\hat{\rho}^{(1)} = \delta_{nn'} n_{\text{FD}} \epsilon_n \underset{T \rightarrow 0}{=} \delta_{nn'} \Theta(\epsilon_n < 0) \quad (9.4)$$

met  $\{\epsilon_n\}$  de energieniveaus vóór de quench. Omwille van een asymmetrie van de dispersierelatie (door het kiezen van de fase  $k = 0$  als basistoestand) moet de stapfunctie echter artificeel gedefinieerd worden in de oorsprong als  $\Theta(0) \approx 0.8$  om de onttrekbare geproduceerde arbeid een gladde functie te maken van de systeemgrootte  $L$ . Deze



$H_1$  enerzijds en anderzijds het inproduct van beide vectoren tegengesteld gesorteerd.

### 9.3.2 Voorwaartse quench in $x$ -ruimte

Leg de waarden vast van  $L, \lambda, J/\tau$ .

Construeer de Hamiltoniaan voor de quench  $rH_0$  met enkel hoppingelementen  $-\tau$  op de eerste nevendiagonaal en de  $(1, L)$  en  $(L, 1)$ -posities (wegens periodieke randvoorwaarden).

Construeer de Hamiltoniaan na de quench  $rH_1$  met dezelfde hoppingelementen en daarnaast elementen  $J \cos(2\pi j/\lambda)$  op de hoofddiagonaal.

- 4 Bepaal numeriek eigenwaarden en eigenvectoren van  $rH_0$ , sorteer beide lijsten corresponderend volgens toenemende eigenwaarde, noem de matrix van de eigenvectoren  $U_0$ .

Construeer de begintoestand  $d\rho_0$  volgens (9.5) in de basis die  $rH_0$  diagonaliseert.

Doe een unitaire transformatie  $r\rho = U_0 \cdot d\rho_0 \cdot U_0^\dagger$ , dit geeft de dichtheidsmatrix in positiebasis.

Bepaal numeriek de eigenwaarden en eigenvectoren van  $rH_1$  in de matrix  $U_1$ .

Transformeer  $r\rho$  met  $U_1$  naar  $d\rho_1$  in de nieuwe eigenbasis en bewaar de diagonaal.

### 9.3.3 Achterwaardse quench in $k$ -ruimte

Leg de waarden vast van  $L, \lambda, J/\tau$ .

- 2 Construeer  $kH_{-1}, KH_0$  met resp. zonder de externe potentiaal. Bepaal  $\text{perm1}$  als de permutatie die de diagonaalelementen olopend sorteert en permuteer alle rijen en kolommen van  $kH_{-1}$  volgens  $\text{perm1}$ .
- Bepaal de eigenwaarden en eigenvectoren van  $kH_{-1}$ ,  $\text{perm2}$  als de permutatie die de eigenwaarden olopend sorteert. Permuteer de eigenvectoren volgens  $\text{perm2}$  om de matrix  $U$  te creëren.
- Construeer de begintoestand  $d\rho_{-1}$  volgens (9.5).
- Transformeer via  $U$  naar  $k\rho$  en bewaar de diagonaal.

### 9.3.4 Achterwaardse quench in $x$ -ruimte

Leg de waarden vast van  $L, \lambda, J/\tau$ .

Construeer  $rH_{-1}, rH_0$  met resp. zonder de externe potentiaal.

Bepaal de eigenwaarden en eigenvectoren van  $rH_{-1}$ , sorteer volgens toenemende eigenvectoren en construeer hiermee de matrix  $U_{-1}$ .

- 4 Construeer de begintoestand  $d\rho_{-1}$  volgens (9.5) in de basis die  $rH_{-1}$  diagonaliseert. Transformeer via  $U_{-1}$  naar  $r\rho$  in de positiebasis.
- Bepaal eigenwaarden en eigenvectoren van  $rH_0$ , transformeer hiermee  $r\rho$  unitair naar de diagonale basis  $dH_0$  en bewaar de diagonaal.



Deel III

RESULTATEN EN DISCUSSIE



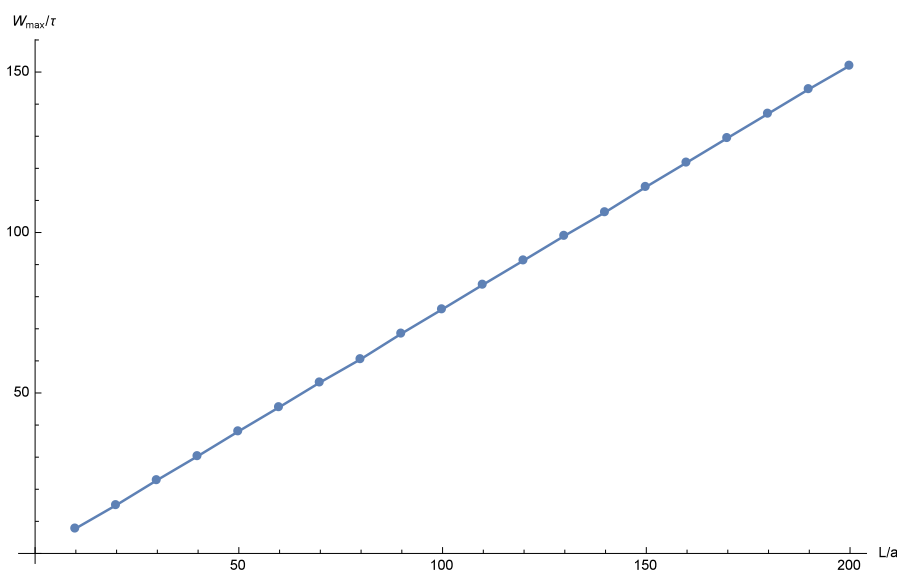


## RESULTATEN VAN DE QUENCH

## 10.1 VOORWAARTSE QUENCH

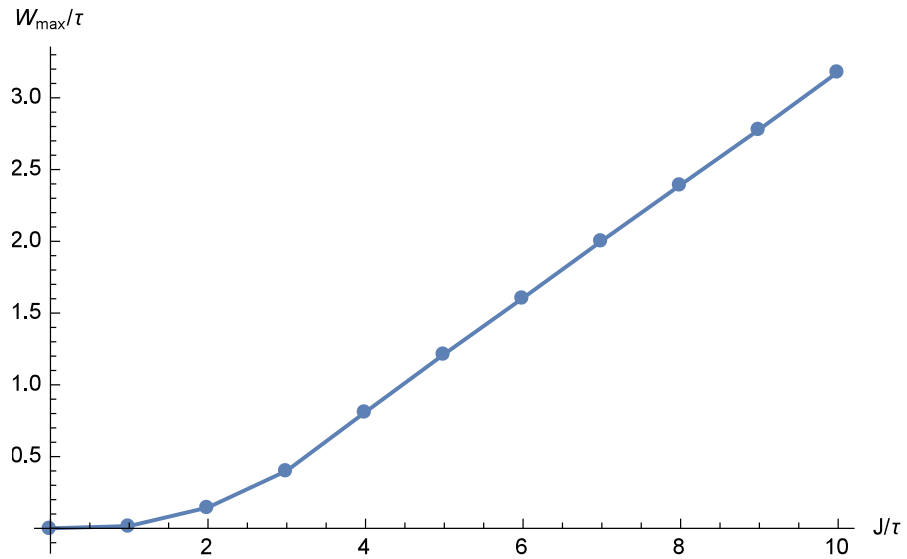
De onttrekbare arbeid die door de voorwaartse quench ontstaat wordt weergegeven als functie van  $L$  op [figuur 10.1](#) en als functie van  $J$  op [figuur 10.2](#). De onttrekbare arbeid blijkt lineair in de systeemgrootte (is een extensieve grootheid), wat toegeschreven kan worden aan het lokale karakter van deze quench.

Het gedrag als functie van  $J$  komt voort uit twee zaken: de bezettingen van  $k$ -toestanden en de waarden van de energieniveaus. Op [figuur 10.3](#) worden de bezettingstoestanden na de quench weergegeven als functie van de energie. Merk op dat met elke energie twee  $k$ -toestanden overeenkomen.  $L$  bepaalt enkel de dichtheid van het spectrum, maar heeft verder geen kwalitatieve invloed op de vorm van de verdelingen. Van zodra  $J \approx 3$  zullen de bezettingen van  $k$ -toestanden nog slechts amper veranderen en het lineaire gedrag als functie van  $J$  is dan te wijten aan de energieniveaus op [figuur 9.1](#). In ieder geval blijkt dat de toestanden zich in een klein aantal banden groeperen, zoals voorheen voorspeld.

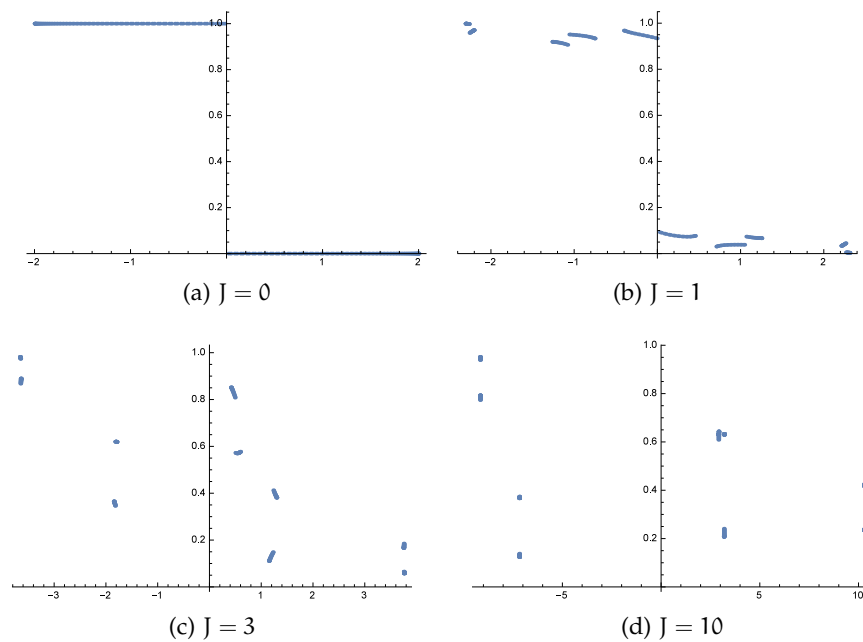


Figuur 10.1: Afhankelijkheid van de onttrekbare arbeid van de systeemgrootte na een voorwaartse quench met  $J = 8$ .

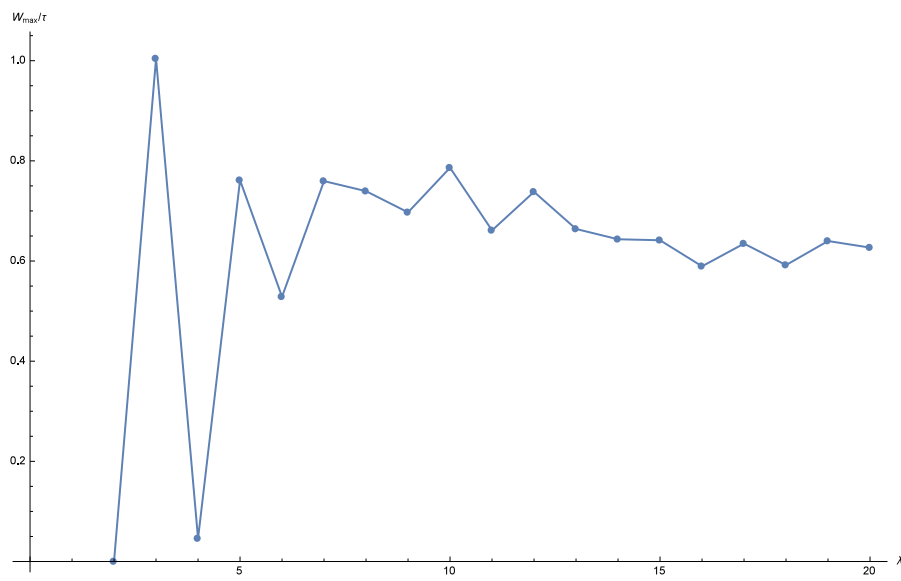
De dichtheid aan onttrekbare arbeid als functie van  $\lambda$  wordt weergegeven op [figuur 10.4](#). Bij periode  $\lambda = 2$  is er geen arbeid te onttrekken, voor hogere waarden zal deze onttrekbare arbeid oscilleren, maar een constante benaderen voor  $\lambda$  voldoende groot.



Figuur 10.2: Afhangelijkheid van de onttrekbare arbeid van de quenchparameter  $J$  na een voorwaartse quench, genormaliseerd op systeemgrootte.



Figuur 10.3: Bezettingen als functie van de energie voor verschillende waarden van  $J$ . Voor  $J = 1$  is de afhankelijkheid duidelijk sterk, kwalitatief is het verschil tussen  $J = 3$  en  $J = 10$  veel kleiner. Het feit dat er dikwijls twee bezettingswaarden voor gelijke energie verschijnen, is een gevolg van ontanding door het feit dat de cosinus een symmetrische functie is.



Figuur 10.4: Afhangelijkheid van de onttrekbare arbeid van de golflengte voor  $J = 8$ . De berekening werd telkens uitgevoerd voor  $L = 20\lambda$ .

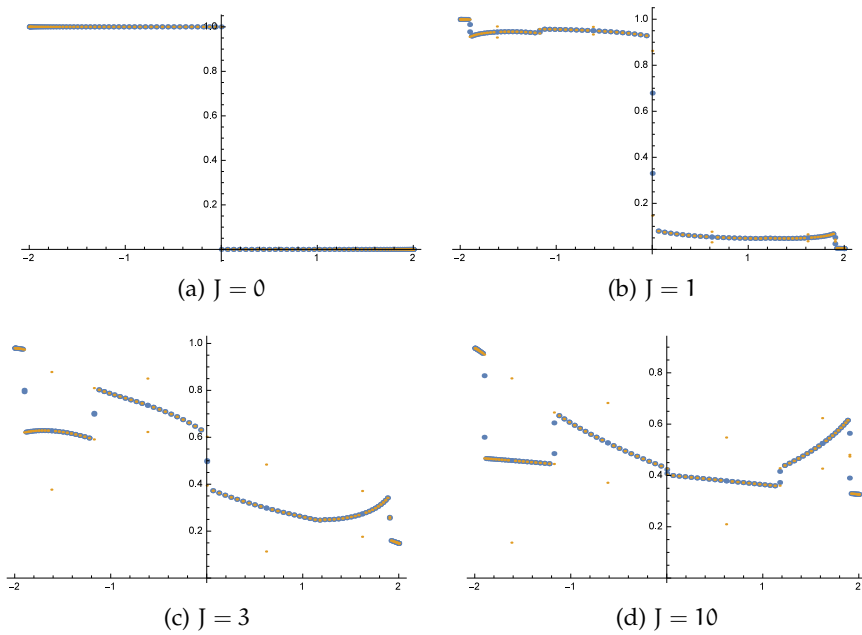
## 10.2 ACHTERWAARTSE QUENCH

De bezettingen na achterwaartse quench worden weergegeven op [figuur 10.5](#). Op een aantal discrete punten verschillen de resultaten van de berekeningen in  $k$ -ruimte en in reële ruimte. Dit is een gevolg van ontandingen, waarbij er a priori geen voorkeur bestaat voor keuze van de basisvectoren in de eigenruimte. Bij de berekening in  $k$ -ruimte werd al impliciet de basis van de vlakke golven  $e^{ikx}$  gekozen, bij numerieke diagonalisatie vanuit de  $x$ -ruimte zijn andere combinaties mogelijk zoals  $\cos(kx)$  en  $\sin(kx)$ . Het is de keuze van basis die nochtans bepaalt welke elementen er op de diagonaal van de dichtheidsmatrix terechtkomen en dus behouden worden, dus de keuze van basis geeft hier wel degelijk een verschillend resultaat. Om dit probleem op te vangen wordt louter verdergewerkt met het resultaat van de berekeningen in  $k$ -ruimte. Deze ontanding verdwijnt ook bij gebruik van de Galilei-verschoven basistoestanden ingevoerd om de samenvallende resonanties te vermijden.

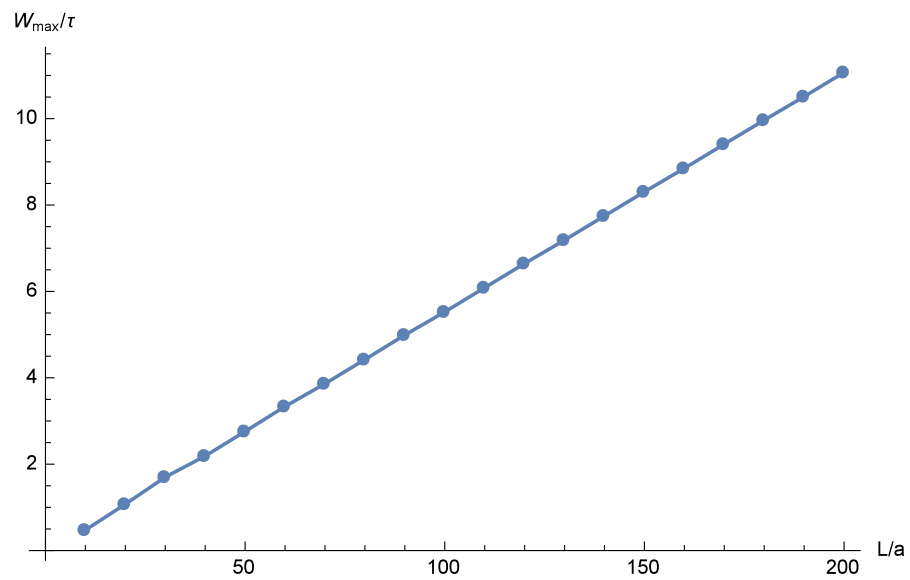
Het gedrag van de onttrekbare arbeid als functie van de systeemgrootte wordt weergegeven op [figuur 10.6](#). Deze onttrekbare arbeid heeft opnieuw duidelijk een extensief karakter.

Als functie van  $J$  werd de onttrekbare arbeid uitgezet op [figuur 10.7](#). Omdat de energietoestanden na de quench in dit geval onafhankelijk zijn van  $J$ , evolueert de onttrekbare arbeid ook naar een constante (in plaats van lineair gedrag).

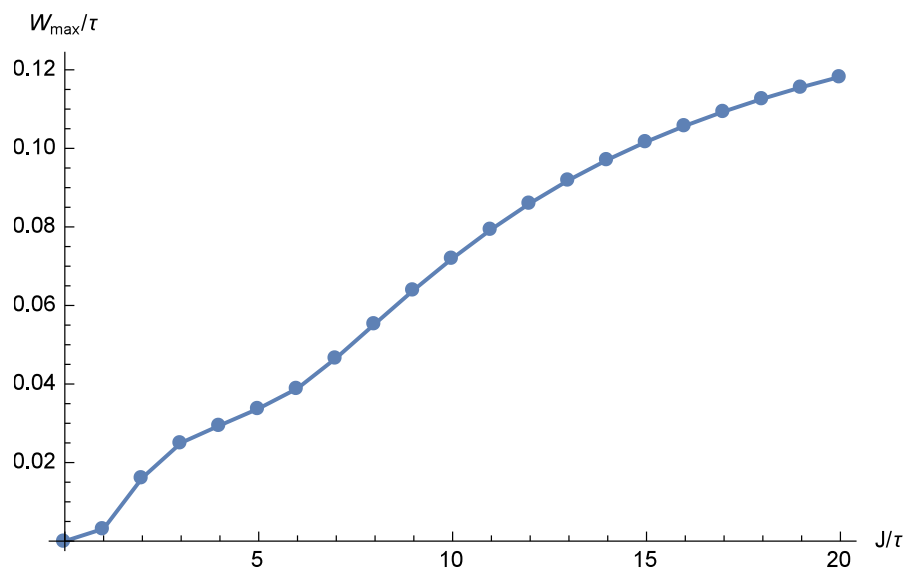
De dichtheid aan onttrekbare arbeid als functie van  $\lambda$  wordt weergegeven op [figuur 10.8](#). In tegenstelling tot de voorwaartse quench blijft dit gedrag oscillerend met regelmatige waarden  $\{\lambda = 2 + 4m | m \in \mathbf{N}\}$  waar de onttrekbare arbeid nul wordt. Dit kwalitatieve gedrag blijft bestaan voor verschillende waarden van  $J$  en  $L$ . Het feit dat er geen arbeid valt te onttrekken blijkt uit de bezettingen na quench zoals weergegeven voor bijvoorbeeld  $\lambda = 6$  op [figuur 10.9](#) samen met het eigenwaardenspectrum als functie van  $J$ . Voor alle even waarden van  $\lambda$  is dit spectrum symmetrisch, maar bij de gevallen waar  $\lambda$  even is, maar toch geen arbeid valt te onttrekken convergeren meerdere banden naar nul voor  $J \rightarrow \infty$ .



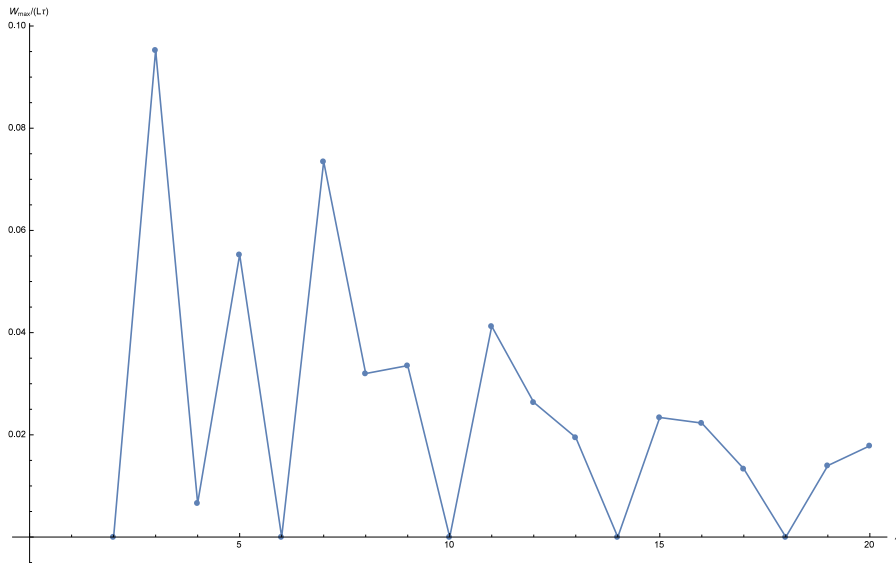
Figuur 10.5: Bezettingen als functie van de energie voor verschillende waarden van  $J$  na de achterwaartse quench. Opnieuw vinden de grootste veranderingen plaats bij kleine  $J$  en zal voor hogere  $J$  de verandering minimaal worden. Merk op dat, in tegenstelling tot de voorwaartse quench, de energieschaal op de horizontale as hetzelfde blijft voor de vier verdelingen. De blauwe stippen zijn het resultaat van de berekeningen in  $k$ -ruimte, de oranje stippen van de berekeningen in reële ruimte.



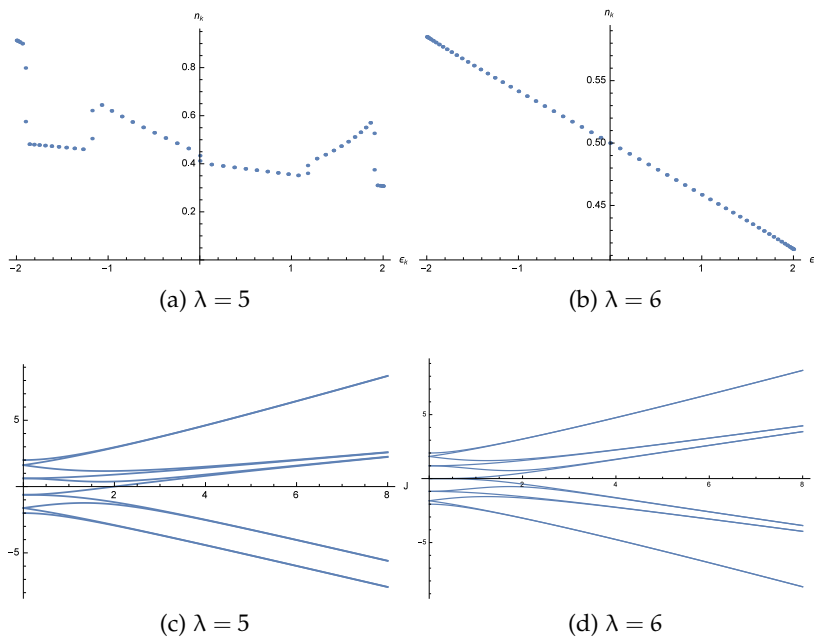
Figuur 10.6: Afhankelijkheid van de onttrekbare arbeid van de systeemgrootte na een achterwaartse quench met  $J = 8$ .



Figuur 10.7: Afhankelijkheid van de onttrekbare arbeid van de quenchparameter  $J$  na een achterwaartse quench, genormaliseerd op systeemgrootte.



Figuur 10.8: Afhangelijkheid van de onttrekbare arbeid van de golflengte voor  $J = 8$ . De berekening werden opnieuw uitgevoerd bij  $L = 20 \lambda$



Figuur 10.9: De bezettingen na achterwaartse quench bij  $J = 8$  (boven) en dispersierelaties als functie van  $J$  (onder) voor twee verschillende waarden van  $\lambda$ .

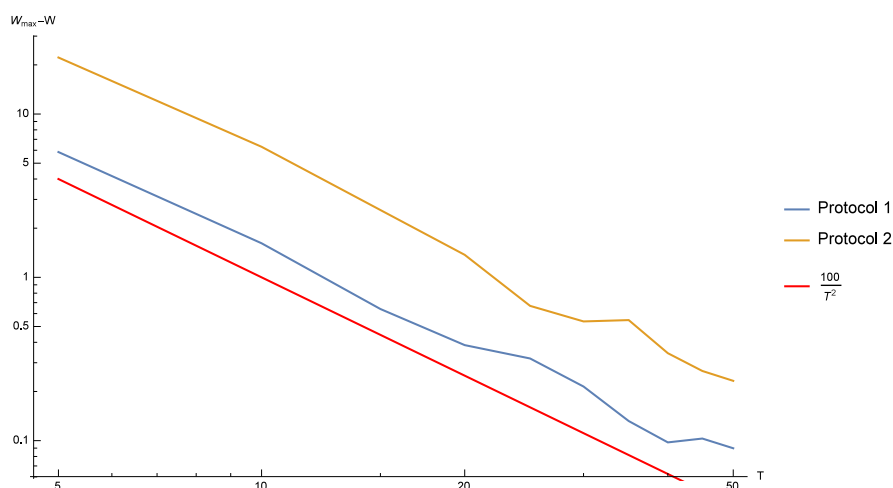




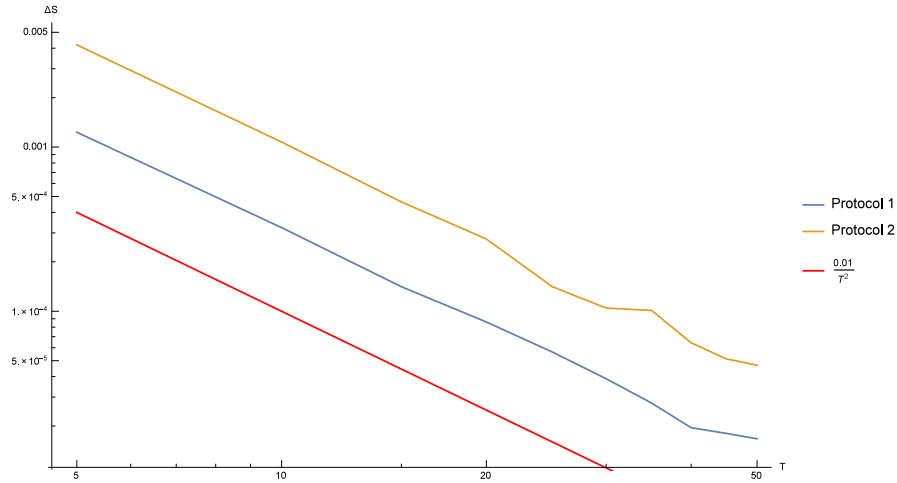
## VRIJ FERMIONENGAS

## 11.1 VANUIT GEQUENCHTE TOESTAND

Om een vergelijking te kunnen maken met het gedrag van de tight-bindinghamiltoniaan wordt de arbeid onttrokken uit een reeks bezettingen corresponderend met de toestand van de besproken quench. Voor het fermionengas is deze toestand louter illustratief aangezien de finale hamiltoniaan na quenching expliciet de tight-binding vorm heeft. Het is puur principieel natuurlijk wel mogelijk een adiabatische overgang te maken van de tight-bindinghamiltoniaan naar het vrij fermionengas. Om kwantitatieve vergelijkingen te kunnen maken met de resultaten berekend in het tight-bindingrooster is de identificatie  $\alpha = \tau$ ;  $q_0 = \frac{2\pi}{T}$  nodig. De geproduceerde arbeid en entropie worden respectievelijk weergegeven op [figuur 11.1](#) en [figuur 11.2](#). Op beide grafieken is duidelijk een kwadratisch verval te zien voor de twee protocols. Dit gedrag als functie van  $T$  wordt verklaard in de volgende sectie. Het is duidelijk dat protocol 1 bij deze opstelling efficiënter is dan protocol 2, d.w.z. de operaties in protocol 1 kunnen bij lagere  $T$ , dus sneller, worden uitgevoerd dan in protocol 2 om eenzelfde arbeid te onttrekken. Hierbij dient opgemerkt te worden dat het relatieve verschil wel minimaal is ten opzichte van de totale onttrekbare energie, zodat zolang er een redelijke fout (corresponderend met  $\Delta S$ ) toegestaan is, beide protocols bruikbaar zijn.



Figuur 11.1: Verschil  $\Delta W$  tussen de onttrekbare arbeid  $W_{\max}$  en de onttrokken arbeid  $W(T)$  als functie van de willeltijd  $T$  met  $W_{\max} = 2849.56\alpha$ . Bij protocol 1 daalt dit verschil als  $\Delta W \approx 160/T^2$  en bij protocol 2 als  $\Delta W \approx 550/T^2$



Figuur 11.2: Entropietoename na protocols voor arbeidsonttrekking bij een vrij fermionengas vanuit quenchoestand als functie van de wisseltijd  $T$ . Bij protocol 1 is  $\Delta S \approx 0.03T^{-2}$ , bij protocol 2 is  $\Delta S \approx 0.1T^{-2}$ .

## 11.2 ANALYTISCHE AFLEIDING VAN HET GEDRAG

Beschouw een enkele Bragg-operatie met impuls  $q$  en energie  $\omega$  die wordt uitgeoefend op het systeem. Door veralgemening van de formule voor Rabi-Oscillaties (7.16) naar een superpositie van verwisselingen kan de som van alle uitgewisselde elementen geschreven worden als

$$\sum_k \frac{\sin^2 \left( \sqrt{1 + \left( \frac{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \omega}{V_0} \right)^2} \frac{V_0 T}{2} \right)}{1 + \left( \frac{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \omega}{V_0} \right)^2} N_k \quad (11.1)$$

met  $N_k$  de bezetting van niveau  $k$  voor de operatie, we zullen benaderen dat deze een constante is en dus uit de som kan gehaald worden. Dit is uiteraard niet het geval, maar de resultaten zullen bruikbaar blijken. Bovenstaande uitdrukking zou ook eenvoudig in termen van de sinc-functie kunnen worden geformuleerd. Met  $\epsilon_k = k^2$  wordt deze uitdrukking langs boven begrensd door

$$N \sum_k \frac{1}{1 + \left( \frac{2kq + q^2 - \omega}{V_0} \right)^2} \quad (11.2)$$

Wordt de bragg spectroscopie uitgevoerd met het doel om  $k = 0$  en  $k = 1$  te wisselen, worden de parameters  $q = q_0 = 1$ ,  $\omega = 1$  gekozen. De som van de ongewenste bijdragen wordt dan (op een factor  $N$  na) gegeven door

$$\sum_{\substack{k=-\infty \\ k \neq 0}}^{\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{2k}{V_0}\right)^2} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 + \left(\frac{2k}{V_0}\right)^2} \quad (11.3)$$

$$= -1 + \frac{\pi V_0}{2} \coth \frac{\pi V_0}{2} \quad (11.4)$$

$$= \left(\frac{\pi V_0}{2}\right)^2 / 3 - \left(\frac{\pi V_0}{2}\right)^4 / 45 + \mathcal{O} \left[ \left(\frac{\pi V_0}{2}\right)^6 \right] \quad (11.5)$$

wat in leidende orde een kwadratische afhankelijkheid van  $V_0$  oplevert, of equivalent een kwadratische daling als functie van de wisseltijd  $T$  (onder de voorwaarde voor verwisseling  $V_0 T = \pi$ ). Bovenstaand resultaat is eveneens geldig voor elk ander paar niveaus, dit wordt aangetoond als volgt.

Het verschil tussen de energieniveaus  $\epsilon_{k+q}$  en  $\epsilon_k$  bedraagt  $2q + q^2$ , en voor de geroteerde toestanden

$$\tilde{\epsilon}_{k+q} - \tilde{\epsilon}_k = 2kq + q^2 - \omega. \quad (11.6)$$

$\omega$  wordt gekozen zodat een paar niveaus  $k'$  en  $k' + q$  in resonantie komt, waaruit

$$\tilde{\epsilon}_{k'+q} - \tilde{\epsilon}_{k'} = 0 = 2k'q + q^2 - \omega \Rightarrow \omega = 2k'q + q^2. \quad (11.7)$$

Invullen in (11.6) levert dan

$$\tilde{\epsilon}_{k+q} - \tilde{\epsilon}_k = 2q(k - k'), \quad (11.8)$$

een uitdrukking die enkel linear afhangt van de afstand tot de overgang. Wanneer over  $k$  een oneindige sommatie uitgevoerd wordt volstaat het een substitutie  $(k - k') \rightarrow k$  uit te voeren om opnieuw uitdrukking (11.3) te bekomen. Wanneer  $q \neq q_0$  kunnen de  $k$ -toestanden waarover gesommeerd moet worden niet enkel geheel worden gekozen, en loopt de som over andere waarden. Het resultaat blijkt echter bruikbaar te blijven.

De combinatie van alle braggverwisselingen levert dan opnieuw een kwadratische daling van het totaal aantal foute verwisselingen. In het regime waar de variaties relatief klein zijn, kunnen de arbeid en entropietoename beschouwd worden als lineaire functies van deze offdiagonaalsom, zodat deze functies kwadratisch vervallen, wat ook op bovenstaande fits duidelijk te merken is. Ondanks de benaderingen dat  $N$  altijd gelijk is, dat elke  $q$  zich als  $q_0$  gedraagt en dat het aantal niveaus oneindig is, blijven de resultaten dus geldig.



Aangezien de gebruikte achterwaartse quenching eindigt bij een tight-bindinghamiltoniaan is het altijd fysisch geldig om deze te gebruiken als begintoestand voor de Bragg spectroscopie zoals beschreven voor een tight-bindingrooster. Opnieuw werden arbeid en entropie geanalyseerd als functie van de wisseltijd  $T = \pi/V_0$  waarmee de operaties worden uitgevoerd. Zoals besproken in [sectie 8.2.1](#) kunnen bij minder goede keuze van de basisvectoren verschillende resonantiefrequenties samenvallen. Deze situatie werd eerst bestudeerd. Daarna de gesuggereerde oplossingen corresponderend met een Galilei-transformatie en het in rekening brengen van een next-nearest neighbour-hopping bestudeerd. Vergelijken met het vrij fermionengas uit [hoofdstuk 11](#) verloopt de convergentie trager, wat toegeschreven kan worden aan het feit dat alle energieniveaus zich in dit tight-bindingmodel dichter bij elkaar bevinden en dus de ongewenste overgangen ook dichter bij resonantie komen. Er blijkt in tegenstelling tot het fermionengas geen eenvoudige universele beschrijving van het gedrag te vinden, met in het beste geval gebieden waar  $\Delta S \propto T^{-1}$ . In bijna alle gevallen blijkt protocol 2 bij de tight-bindinghamiltoniaan efficiënter dan protocol 1. Merk op dat het vermogen gedefinieerd wordt als  $P = W/T_{\text{duur}}$ , met  $T_{\text{duur}}$  de totale duur, die evenredig is aan de wisseltijd  $T$  zodat onnodig trage operaties een lager vermogen zullen opwekken. De Galilei-verschoven basistoestanden kunnen in principe een verschil in het aantal operaties teweegbrengen; er kan bij perfecte ontaarding van energieniveaus ambigüiteit ontstaan in de optimale sorteringsvolg-orde. Volgens onze implementatie in de functie `orderingToTarget` echter, en meer bepaald door de sorteringsalgoritmes in Mathematica, worden het geval van ontaarding de niveaus toch gerangschikt zodat in het geval van ontaarding de toestand met laagste  $k$  de facto wordt behandeld als hebbende een lagere energie. De gedane Galilei-transformatie heeft dus geen invloed op de permutatie-ontbinding, waardoor in ons geval het aantal verwisselingen niet verandert en de wisseltijd  $T$  ook een goeie indicatie is voor de 'fysieke' tijd nodig voor het uitvoeren van de operaties.

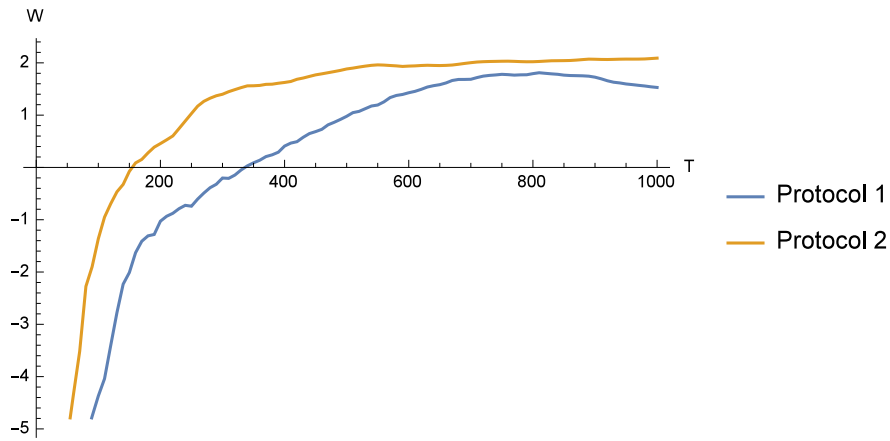
De implementatie waarbij het niveau van één  $k$ -waarde iets lager wordt beschouwd hoeft in de praktijk niet de beste te zijn, het is niet uitgesloten dat een andere sortering van gelijke energieniveaus minder verwisselingen vergt.

## 12.1 ONVERSTOORD

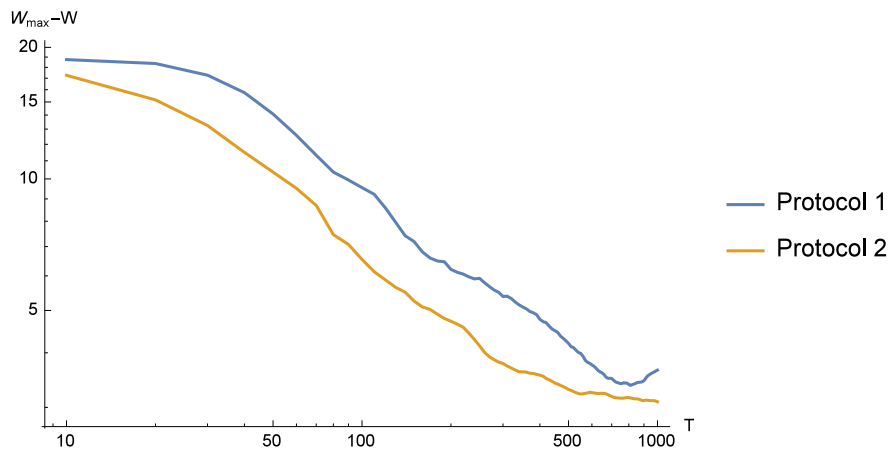
Eerst werd het gedrag bestudeerd voor basistoestanden  $k = n \frac{2\pi}{L}$ ,  $n \in \mathbb{Z} \bmod L$ . De totale onttrekbare arbeid wordt weergegeven op [figuur 12.1](#).

Het is duidelijk dat voor  $T < 150$  (Protocol 2) of  $T < 350$  (Protocol 3) de netto onttrokken arbeid negatief is, wat wil zeggen dat er meer arbeid aan het systeem wordt toegevoegd dan eruit vrijkomt. Waar het bij het uitvoeren van de Bragg-spectroscopie de bedoeling is de energie te verlagen door de rangschikking van de bezettingen te veranderen, verhoogt de nieuwe rangschikking de energie in het geval van te snelle operaties. Dit wijst erop dat er voor het systeem meer toestanden zijn met energie groter dan de gequenchte toestand dan met een energie lager dan de gequenchte toestand. De entropietoename ([figuur 12.3](#)) is namelijk ook het grootst in dit gebied van lage  $T$ , corresponderend met relatief ongerichte operaties die het systeem in een eerder willekeurige toestand doen belanden. De argumenten van Shannon en Jaynes leiden er dan toe te besluiten dat, zonder externe voorwaarden op de energie, het a priori waarschijnlijker is dat het systeem zich in een toestand met hogere energie dan de quenchtoestand bevindt, dan in een toestand met lagere energie. Wanneer  $T$  voldoende groot is, zal de Bragg-operatie voldoende precies zijn zodat strengere voorwaarden opgelegd worden aan de eindtoestand, wat de entropietoename beperkt (voorwaardelijke kans) en het systeem in een meer specifieke toestand terecht komt, namelijk met lagere energie. Hierdoor kan met  $T$  voldoende groot toch arbeid onttrokken worden.

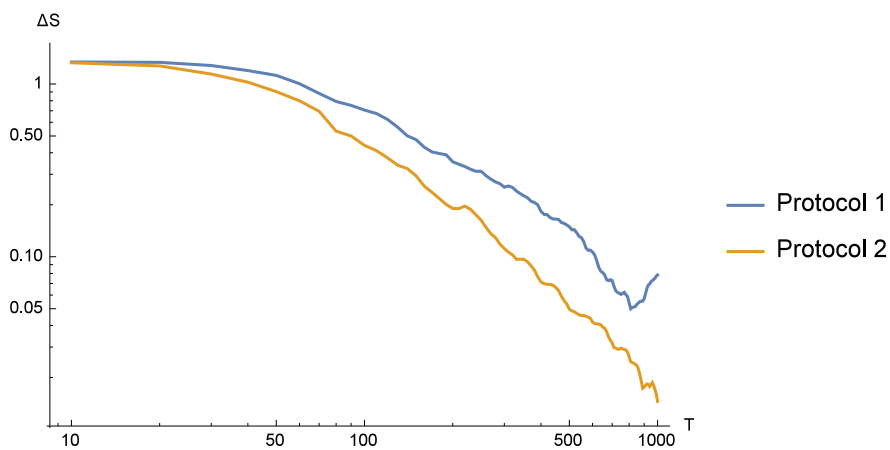
Zoals voorspeld verhindert de keuze van basistoestanden door samenvallende resonanties ook de volledige onttrekking van arbeid. Zoals zichtbaar wordt amper de helft van de theoretisch maximaal haalbare waarde  $W_{\max} = 5.185$  bereikt. Dit verschil tussen theoretische maximum en onttrokken arbeid wordt, naar analogie met de discussie van het fermionengas, weergegeven op [figuur 12.2](#). Het systeem belandt voor hoge  $T$  in een eindtoestand die niet de laagste-energietoestand is, hoewel dit geen enkel gevolg heeft op de entropie. Het gevolg is ook grafisch zichtbaar: in tegenstelling tot situaties waaruit, in de adiabatische limiet, alle arbeid wordt onttrokken gedraagt het verval van het verschil tussen onttrekbare en onttrokken arbeid zich op de log-logschaal niet gelijkaardig aan het verval van de entropie.



Figuur 12.1: Arbeid onttrokken uit ongestoorde tight-bindinghamiltoniaan.



Figuur 12.2: Verschil tussen onttrekbare arbeid  $W_{\max} = 5.185 \tau$  en de effectief onttrokken arbeid uit de ongestoorde tight-bindinghamiltoniaan.

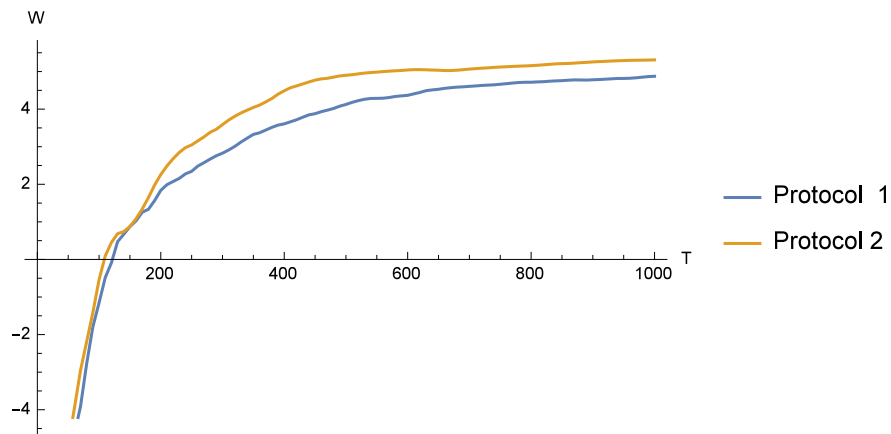


Figuur 12.3: Entropietoename na de bragg spectroscopie-protocols uit de ongestoorde tight-bindinghamiltoniaan.

## 12.2 MET GALILEI-VERSCHOVEN BASISTOESTANDEN

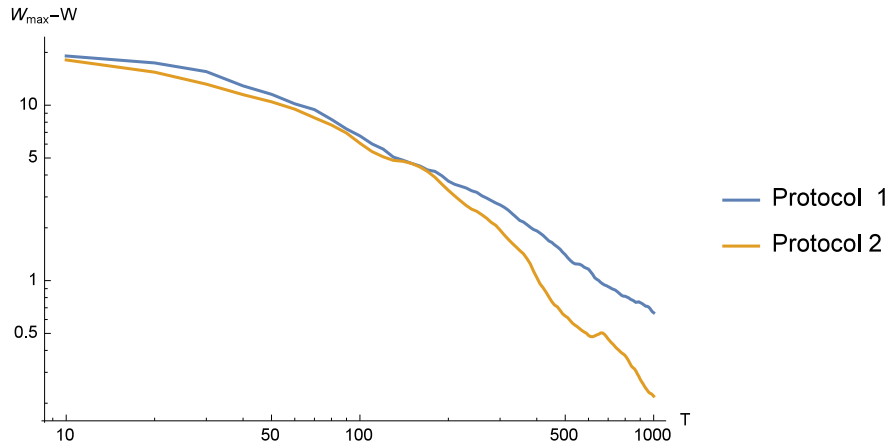
Worden verschoven basistoestanden  $k = n\frac{2\pi}{L} + \varphi$ ,  $n \in \mathbb{Z} \pmod L$  gebruikt, met  $\varphi$  een constante fasefactor, kunnen de resultaten veranderen. Er werd gekozen voor  $\varphi = 0.01$ , groot genoeg om significant te kunnen zijn (o.a. veel groter dan de machineprecisie), maar klein genoeg om nog een zinvolle vergelijking te kunnen doen met de onverschoven toestand. Het proces is grotendeels ongevoelig voor de precieze waarde van  $\varphi$  zolang  $\varphi$  willekeurig genoeg is. Zoals weergegeven op [figuur 12.4](#) en [figuur 12.5](#) leidt dit inderdaad tot een onttrokken arbeid die de maximaal onttrokken arbeid  $W_{\max} = 5.538$  benadert. Het gebruik van deze Galilei-getransformeerde basisvectoren is dus zoals voorspeld een mogelijke oplossing voor het probleem van de samenvallende resonanties. De entropietoename wordt weergegeven op [figuur 12.6](#).

Bovenstaande discussie betreffende de negatieve onttrokken arbeid blijft eveneens geldig.

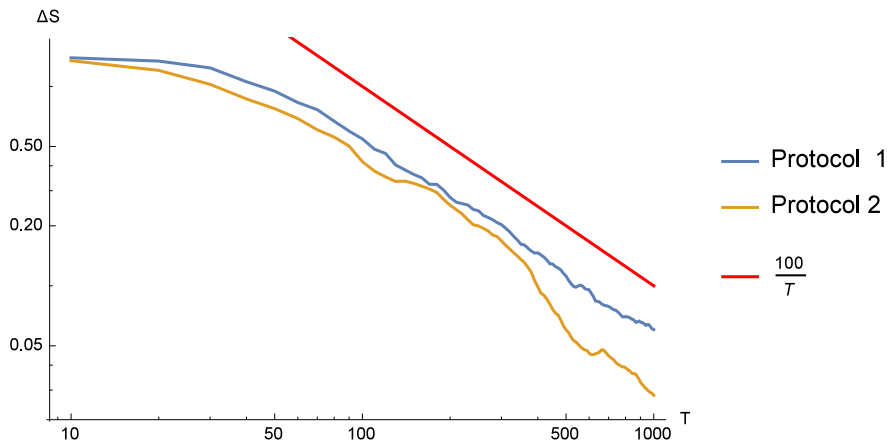


Figuur 12.4: Arbeid onttrokken uit de tight-bindinghamiltoniaan met verschoven basistoestanden





Figuur 12.5: Verschil tussen de onttrekbare arbeid  $W_{\max} = 5.538 \tau$  en de onttrokken arbeid in het geval van de tight-bindinghamiltoniaan met verschoven basistoestanden.



Figuur 12.6: Entropietoename na de protocols voor Bragg-spectroscopie bij een tight-bindinghamiltoniaan met verschoven basistoestanden.

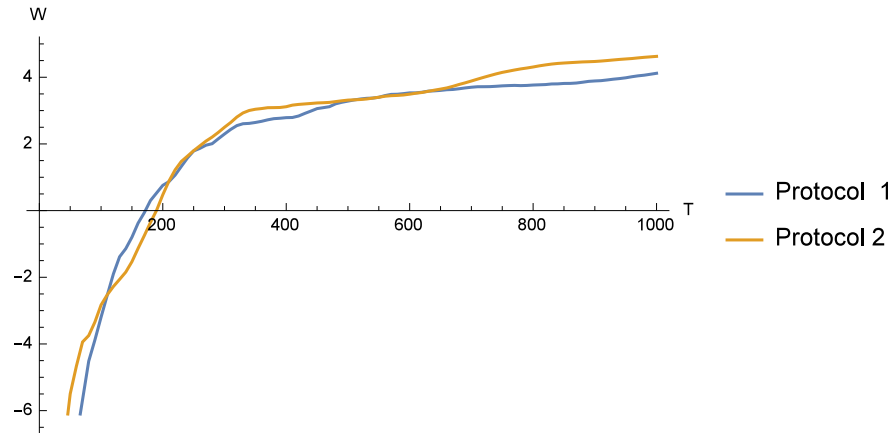
### 12.3 MET NEXT-NEAREST-NEIGHBOURKOPPELING

Als alternatief voor de galilei-transformatie werd next-nearest-neighbour hopping in rekening gebracht. Ook dit principe blijkt het samenvallen van resonanties te verhinderen. Het precieze gedrag kan in dit geval wel sterk afhangen van de precieze waarde van de nnn-hoppingparameter  $\sigma$ . We analyseren het gedrag bij twee specifieke waarden voor  $\sigma$ .

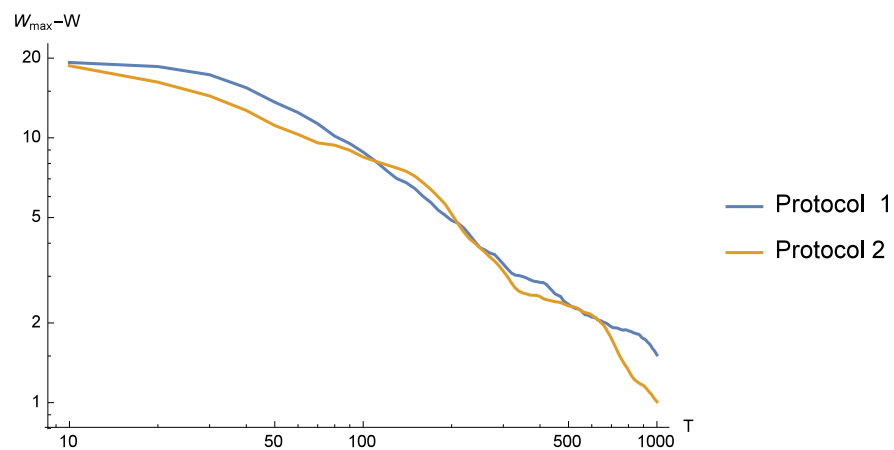
#### 12.3.1 $\sigma/\tau = 0.01$

De onttrokken arbeid wordt weergegeven op [figuur 12.7](#), het verschil met de onttrekbare arbeid op [figuur 12.8](#) en de entropietoename op [figuur 12.9](#). Het valt met name op dat er een gebied  $100 < T < 200$  is

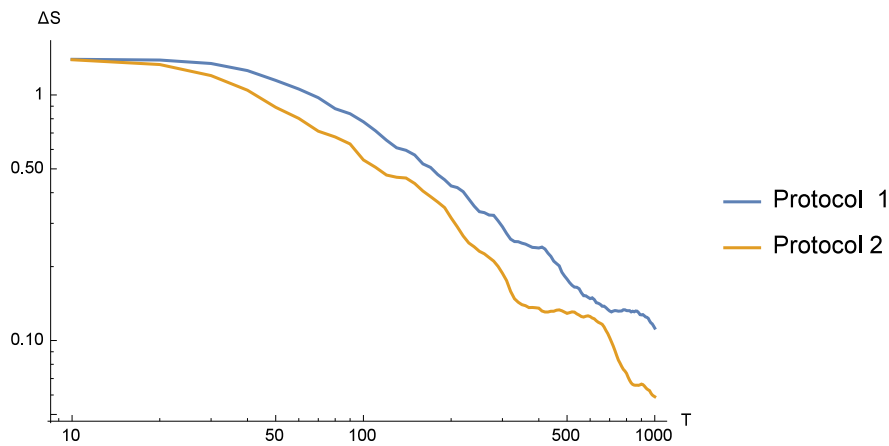
waar protocol 1 meer arbeid onttrekt dan protocol 2, maar dit niet gepaard gaat met een lagere entropietoename voor protocol 1. Dit is een voorbeeld van het feit dat in kwantumsystemen, in tegenstelling tot klassieke systemen, hogere entropie geen hogere onttrekbare arbeid impliceert zoals beschreven in [sectie 4.2](#).



Figuur 12.7: Totale onttrokken arbeid bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.01$ .



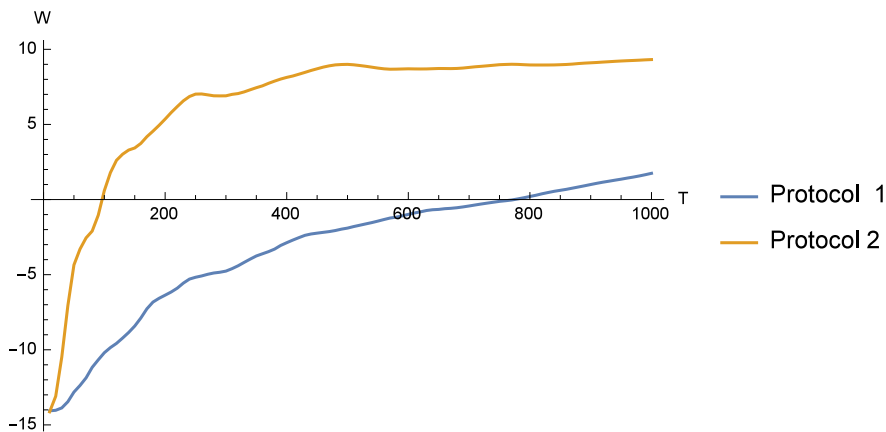
Figuur 12.8: Verschil tussen onttrekbare arbeid  $W_{\max} = 5.634 \tau$  en de onttrokken arbeid bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.01$ .



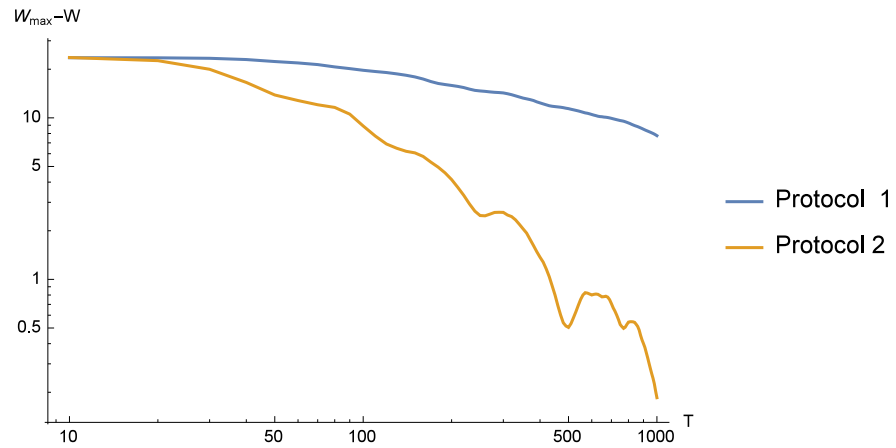
Figuur 12.9: Entropietoename bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.01$ .

### 12.3.2 $\sigma/\tau = 0.1$

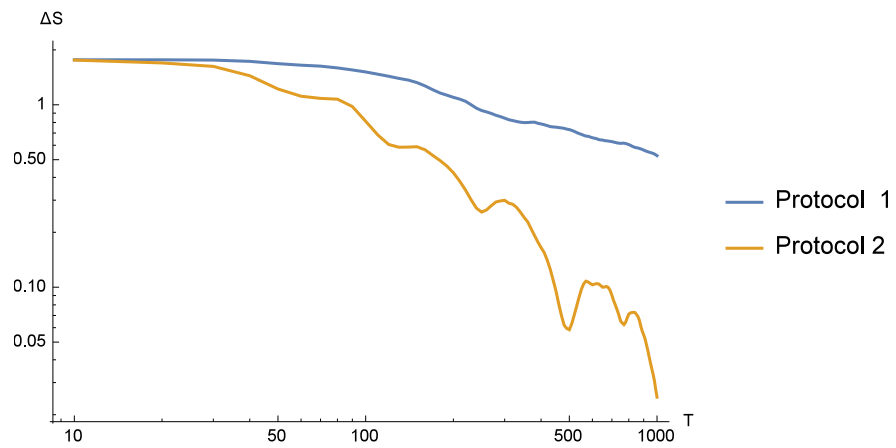
De onttrokken arbeid wordt weergegeven op [figuur 12.10](#), het verschil met de onttrekbare arbeid op [figuur 12.11](#) en de entropietoename op [figuur 12.12](#). In dit geval is er duidelijk een significant verschil tussen beide protocollen, waarbij protocol 1 veel trager convergeert naar de finale toestand. Merk ook de significante verandering van de maximaal onttrekbare arbeid in dit geval naar  $W_{\max} = 9.503$ . Op [figuur 12.13](#) is te zien dat voor veel hogere wisseltijden de onttrokken arbeid ook voor protocol 1 nog dichterbij de totale onttrekbare arbeid groeit.



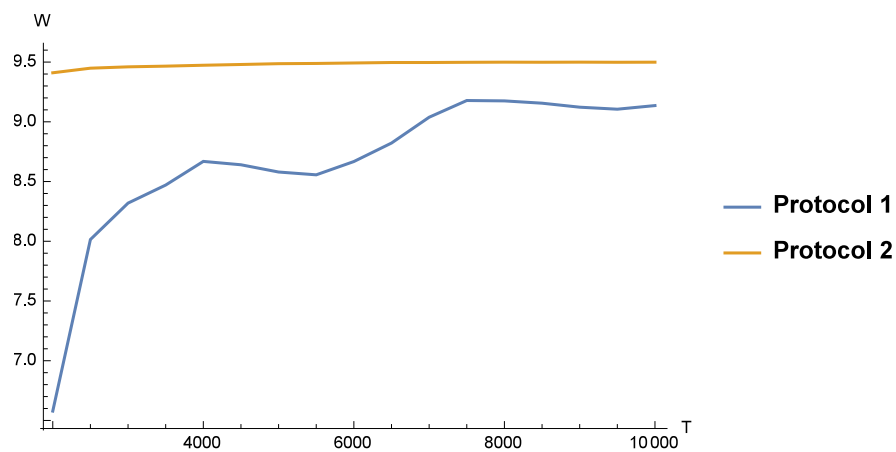
Figuur 12.10: Totale onttrokken arbeid bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.1$



Figuur 12.11: Verschil tussen onttrekbare arbeid  $W_{\max} = 9.503 \tau$  en de onttrokken arbeid bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.1$ .



Figuur 12.12: Entropietoename bij het in rekening brengen van een nnn-hopping  $\sigma = 0.01$ .



Figuur 12.13: Onttrokken arbeid bij een nnn-hopping  $\sigma = 0.1$  voor hogere wisseltijden

## CONCLUSIE

In deze thesis werd, aan de hand van het specifieke voorbeeld van een fermionische keten, aangetoond hoe een integreerbaar kwantumsysteem kan worden beschreven door een Veralgemeend Gibbs-Ensemble. Alle bezettingen zijn voor dit systeem behouden en komen overeen met een specifieke lagrangemultiplicator. Hoewel een integreerbaar systeem reeds per definitie stationair is, kan dit in het algemeen nog in een lagere-energietoestand gebracht worden door permutatie van de lagrangemultiplicatoren, wat resulteert in het onttrekken van arbeid. Er werd aangetoond dat en hoe de permutatie kan worden geconstrueerd uit tweenniveauperwisselingen en hoe de Bragg-Hamiltoniaan, in het geval van een fermionische keten, de juiste unitaire operaties voor deze verwisselingen levert. Deze operaties werden numeriek uitgevoerd op zowel een vrij fermionengas als op een tight-bindingrooster. Er werd expliciet aangetoond hoe een niet-evenwichtstoestand bij tight-bindinghamiltoniaan kan worden gevormd door quenching met een additionele periodische potentiaal. In het tight-bindinggeval moest rekening worden gehouden met de periodiciteit van de dispersierelatie en de toestanden.

In alle gevallen werd de onttrokken arbeid en de entropie onderzocht als functie van de snelheid waarmee de operaties werden uitgevoerd. Zoals te verwachten geeft de adiabatische limiet in alle gevallen de beste resultaten. In het specifieke geval van de dispersie corresponderend met een vrij gas, werd zowel uit de simulatie als analytisch gevonden dat de entropietoename en de niet-onttrokken arbeid kwadratisch dalen met de wisseltijd  $T$ .

Twee protocollen corresponderend met verschillende permutatieontbindingen werden vergeleken. Deze leveren vaak een gelijkaardige efficiëntie, maar in sommige gevallen, zoals bij significante nnn-hopping, kan een significant verschil in efficiëntie optreden. Het kan de moeite zijn verder onderzoek te doen naar de protocollen en wat hun efficiëntie bepaalt. Eventueel zou een hybride protocol kunnen worden geconstrueerd dat in het algemeen efficiënter is. Ook kunnen via onze voorgestelde methode verschillende protocollen worden getest in functie van een specifieke dispersierelatie.

De keuze om de Brillouinzone elke operatie te kiezen met grenzen zo ver mogelijk van de resonante overgang zal zeker beter zijn dan deze Brillouinzone stationair te houden, maar dat wil niet zeggen dat de gebruikte keuze van grenzen noodzakelijk de beste is. De processen die die volgens deze gebruikte keuze verwaarloosd werden zijn deze die het minst gekoppeld zijn met de resonante overgang.

Het is mogelijk beter de grenzen te kiezen bij de overgang die het meest off-resonant is (niet noodzakelijk dezelfde overgang), zodat de (verwaarloosde) umklapp-processen altijd het meest onderdrukt zijn. Het is mogelijk ook een interessante vraag om te onderzoeken of de verloren informatie van de umklapp-processen kan worden gereconstrueerd door de resultaten te vergelijken van de berekeningen die gedaan werden bij verschillende keuze van de Brillouinzones.

De resultaten die in deze thesis bekomen werden voor een keten spinloze fermionen, zijn ook geldig voor een keten hardekernbosonen (bosonische deeltjes op een rooster, die een oneindig sterke  $\delta$ -repulsie energie vertonen). Dit blijkt onder andere uit een Jordan-Wignertransformatie [30], zoals bijvoorbeeld expliciet uitgevoerd in [42]. Deze afbeelding tussen beide soorten deeltjes voegt slechts fasefactoren toe, deze veranderen de teloperatoren niet. Met een Jordan-Wignertransformatie kan het beschouwde systeem eveneens afgebeeld worden op een spinketen, maar zulk spinsysteem is niet langer te interpreteren in de context van Bragg-spectroscopie.

De vraag kan gesteld worden of het GGE-concept wel noodzakelijk is om de fermionische keten te beschrijven; er is immers een één-op-één verband met de één-deeltjes correlatiefunctie (diagonaalelementen van de één-deeltjes dichtheidsmatrix). De onttrokken arbeid is via beide beschrijvingen identiek (arbeid is dan ook direct gerelateerd aan observabelen). Het is wel enkel het GGE dat de besproken entropiefunctie oplevert. Nu is het concept van een GGE in de veel bredere context van integreerbare systemen toepasbaar, en de studie van de onttrekbare arbeid uit deze systemen een kwestie die uitnodigt tot verder onderzoek. Zoals vermeld is het voor een betere beschrijving van het systeem naast de één-deeltjes bezettingen ook nodig tweedeeltjes-correlatiefuncties in rekening te brengen als behouden grootheden.

Er zijn verder nog verschillende mogelijke uitbreidingen van de setup denkbaar. Een eerstvolgende uitbreiding bestaat erin de spinloze fermionen te vervangen door spin- $\frac{1}{2}$  deeltjes zoals elektronen. Het aantal één-deeltjestoestanden verdubbelt in dat geval (twee toestanden voor elke mogelijke  $k$ -waarde). In dat geval kan de polarisatie van het laserlicht invloed uitoefenen op de spintoestanden van de deeltjes. Een andere mogelijke uitbreiding bestaat erin de dimensionaliteit van het systeem te verhogen, van één dimensie naar bijvoorbeeld een tweedimensionaal rooster.

Tot slot kunnen de gebruikte methodes ook integraal worden overgedragen op realistische (gekende) bandenstructuren zolang golfvector een goed (behouden) kwantumgetal is. Door uitgewisselde frequentie en golfvector onafhankelijk te kiezen verwachten we ook geen significante problemen om specifieke banden te selecteren en overgangen tussen verschillende banden uit te voeren. Hierdoor zijn de bevindingen ook experimenteel verifieerbaar.

## BIBLIOGRAFIE

---

- <sup>1</sup>A. Brunello, F. Dalfovo, L. Pitaevskii, S. Stringari en F. Zambelli, "Momentum transferred to a trapped bose-einstein condensate by stimulated light scattering", *Physical Review A* **64** (2001).
- <sup>2</sup>A. Allahverdyan en T. Nieuwenhuizen, "A mathematical theorem as the basis for the second law: thomson's formulation applied to equilibrium", *Physica A* **305**, 542 (2002).
- <sup>3</sup>A. Allahverdyan, R. Ballian en T. Nieuwenhuizen, "Maximal work extraction from finite quantum systems", *Europhysics Letters* **67**, 565 (2004).
- <sup>4</sup>O. Babelon, *A short introduction to classical and quantum integrable systems*, LPTHE Coursenotes, <http://www.lpthe.jussieu.fr/~babelon/saclay2007.pdf>, 2007.
- <sup>5</sup>M. V. Berry, "Regular and irregular semiclassical wavefunctions", *Journal of Physics A: Mathematical and General* **10**, 2083 (1977).
- <sup>6</sup>S. Brush, *Statistical physics and the atomic theory of matter, from boyle and newton to landau and onsager*, Princeton series in Physics (Princeton University Press, 1983).
- <sup>7</sup>L. Chierchia en J. Mather, "Kolmogorov-arnold-moser theory", *Scholarpedia* **5**.
- <sup>8</sup>P. Chomaz, F. Gulminelli en O. Juillet, "Generalized gibbs ensembles for time-dependent processes", *Annals of Physics* **320** (2005).
- <sup>9</sup>A. Cronin, J. Schmiedmayer en D. Pritchard, "Optics and interferometry with atoms and molecules", *Reviews of modern physics* **81**, 1051 (2009).
- <sup>10</sup>J. Dalibard, F. Gerbier, G. Juzeliunas en P. Ohberg, "Colloquium: artificial gauge potentials for neutral atoms", *Reviews of Modern Physics* **83**, 1523 (2011).
- <sup>11</sup>L. Daston, "How probabilities came to be objective and subjective", *Historia Mathematica* **21**, 330 (1994).
- <sup>12</sup>J. M. Deutsch, "Quantum statistical mechanics in a closed system", *Phys. Rev. A* **43**, 2046-2049 (1991).
- <sup>13</sup>D. Egloff, O. Dahlsten, R. Renner en V. Vedral, "A measure of majorization emerging from single-shot statistical mechanics", *New Journal of Physics* **17** (2015).
- <sup>14</sup>M. D. Girardeau, "Relaxation in the localized magnetization in the one-dimensional xy-model", *Physics Letters A* **32** (1970).
- <sup>15</sup>M. Hall, *The theory of groups* (Macmillan, 1959).

- <sup>16</sup>C. Henley, "Fermion operators and hopping bands", 2009.
- <sup>17</sup>M. Hilbert en P. Lopez, "The world's technological capacity to store, communicate, and compute information", *Science* **332** (2011).
- <sup>18</sup>K. Huang, *Statistical mechanics*, second edition (John Wiley & Sons, 1987).
- <sup>19</sup>E. T. Jaynes, "Information theory and statistical mechanics ii", *Phys. Rev.* **108**, 171 (1957).
- <sup>20</sup>E. T. Jaynes, "Information theory and statistical mechanics", *Phys. Rev.* **106**, 620 (1957).
- <sup>21</sup>A. Lenard, "Thermodynamical proof of the gibbs formula for elementary quantum systems", *Journal of Statistical Physics* **19**, 575 (1978).
- <sup>22</sup>E. Lieb en J. Yngvason, "The physics and mathematics of the second law of thermodynamics", *Physics Reports* **310**, 1–96 (1999).
- <sup>23</sup>M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. Haensch en I. Bloch, "Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms", *Nature* **425** (2002).
- <sup>24</sup>M. Horecki en J. Oppenheim, "Fundamental limitations for quantum and nanoscale thermodynamics", *Nature Communications* **4** (2013).
- <sup>25</sup>A. W. Marshall, I. Olkin en B. C. Arnold, *Inequalities: theory of majorization and its applications*, 2de ed., Springer Series in Statistics (Springer-Verlag New York, 2011).
- <sup>26</sup>C. Menotti, M. Kramer, L. Pitaevskii en S. Stringari, "Dynamic structure factor of a bose-einstein condensate in a one-dimensional optical lattice", **67** (2003).
- <sup>27</sup>D. Mermin, *Qbism puts the scientist back into science*, Nature Comment, 2014.
- <sup>28</sup>I. Mueller, *A history of thermodynamics: the doctrine of energy and entropy* (Springer, 2007).
- <sup>29</sup>R. Nandkishore en D. Huse, "Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics", *Annual Review of Condensed Matter Physics* **6** (2015).
- <sup>30</sup>M. Nielsen, "The fermionic canonical commutation relations and the jordan-wigner transform", 2005.
- <sup>31</sup>J. Parrondo, J. Horowitz en T. Sagawa, "Thermodynamics of information", *Nature Physics* **11**, 131 (2015).
- <sup>32</sup>M. Perarnau-Llobet, A. Riera, R. Gallego, H. Wilming en J. Eisert, "Work and entropy production in generalized gibbs ensembles", arXiv:1512.03823v2, 2015.
- <sup>33</sup>L. Pitaevskii en S. Stringari, *Bose-einstein condensation*, International Series of Monographs on physics 116 (Oxford Science Publications, 2003).



- <sup>34</sup>A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva en M.Vengalattore, “Colloquium:nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems”, *Reviews of modern physics* **83**, 863 (2011).
- <sup>35</sup>W. Pusz en S. L. Woronowicz, “Passive states and kms states for general quantum systems”, *Communications in Mathematical Physics* **58**, 273 (1978).
- <sup>36</sup>G. O. R.D. Somma, *Quantum quenching, annealing and computation*, 1ste ed., *Lecture Notes in Physics* 802 (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010).
- <sup>37</sup>F. Reif, *Statistical physics*, deel 5, *Berkeley Physics Course* (McGraw-Hill book company, 1967).
- <sup>38</sup>A. Rey, P. Blakie, G. Pupillo, C. Williams en C. Clark, “Bragg spectroscopy of ultracold atoms loaded in an optical lattice”, *Physical Review A* **72** (2005).
- <sup>39</sup>M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky en M. Olshanii, “Relaxation in a completely integrable many-body quantum system: an ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1d lattice hardcore bosons”, *Physical Review Letters* **98** (2007).
- <sup>40</sup>M. Rigol, V. Dunjko en M. Olshanii, “Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems”, *Nature* **452**, 854 (2008).
- <sup>41</sup>J. Roßnagel, S. Dawkins, K. Tolazzi, O. Abah, E. Lutz, F. Schmidt-Kaler en K. Singer, “A single-atom heat engine”, *Science* **352**, 325–329 (2016).
- <sup>42</sup>V. Rousseau, D. Arovos, M. Rigol, F.Hebert, G. Batrouni en R. Scappellato, “Exact study of the one-dimensional boson hubbard model with a superlattice potential”, *Physical Review B* **72** (2006).
- <sup>43</sup>S.Blanes, F. Casas, J. Oteo en J.Ros, “The magnus expansion and some of its applications”, *Physics Reports* **470**, 151 (2009).
- <sup>44</sup>J. Sakurai en J. Napolitano, *Modern quantum mechanics*, second (Pearson, 2011).
- <sup>45</sup>L. Santos, A. Polkovnikov en M. Rigol, “Entropy of isolated quantum systems after a quench”, *Physical Review Letters* **107** (2011).
- <sup>46</sup>D. Sels en M. Wouters, “Stationary ensemble approximations of dynamic quantum states: optimizing the generalized gibbs ensemble”, *Phys. Rev. E* **92** (2015).
- <sup>47</sup>D. Sels en M. Wouters, “The second law in closed quantum systems: extracting work from gge’s”, *werknota*, 2015.
- <sup>48</sup>C. Shannon, “The mathematical theory of communication”, *Bell System Tech. J.* **27**, 379,623 (1948).
- <sup>49</sup>L. Sklar, *Physics and chance: philosophical issues in the foundations of statistical mechanics* (Cambridge University Press, 1993).

- <sup>50</sup>P. Skrzypczyk, A. Short en S. Popescu, "Work extraction and thermodynamics for individual quantum systems", *Nature Communications* **5** (2013).
- <sup>51</sup>M. Srednicki, "Chaos and quantum thermalization", *Phys. Rev. E* **50**, 888–901 (1994).
- <sup>52</sup>M. Srednicki, *Quantum field theory* (Cambridge University Press, 2006).
- <sup>53</sup>J. Stenger, S. Inouye, A. Chikkatur, D. Stamper-Kurn, D. Pritchard en W. Ketterle, "Bragg spectroscopy of a bose-einstein condensate", *Physical Review Letters* **82** (1999).
- <sup>54</sup>A. Tridgell, "Efficient algorithms for sorting and synchronization", proefschrift (Australian National University).
- <sup>55</sup>J. Uffink, "Bluff your way in the second law of thermodynamics", *Studies in History and Philosophy of Science part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **32**, 305 (2001).
- <sup>56</sup>R. A. Wilson, *Graphs, colourings and the four-colour theorem* (Oxford university press, 2002).
- <sup>57</sup>A. Wright, "The physics of forgetting, thermodynamics of information at ibm 1959-1982", *Perspectives on Science* (2016).
- <sup>58</sup>J. G. et al., *Horizons technical report*, version 3.75, [ftp://ssd.jpl.nasa.gov/pub/ssd/Horizons\\_doc.pdf](ftp://ssd.jpl.nasa.gov/pub/ssd/Horizons_doc.pdf) (NASA Jet Propulsion Laboratory, 2013).
- <sup>59</sup>faysou, *How to order a list to match the order of another list?*, <http://mathematica.stackexchange.com/questions/100084/how-to-order-a-list-to-match-the-order-of-another-list>.