

Zusammenfassung

Lange Dekohärenzzeiten sind von enormer Bedeutung für die Quanteninformationsverarbeitung. Nur falls die Speicherdauer von Informationen in den Quantenbits lang genug ist und eine ausreichend große Anzahl an Operationen durchgeführt werden kann, können Quantenalgorithmen erfolgreich implementiert und die Vorteile gegenüber einem klassischen Computer ausgenutzt werden.

In dieser Dissertation wird die Dekohärenz eines Elektronenspins im Zentralspinmodell untersucht, in dem ein einzelner Spin an ein Bad aus nicht wechselwirkenden Spins gekoppelt ist. Das Zentralspinmodell hat sich innerhalb des letzten Jahrzehnts als eine effektive Beschreibung für die Dekohärenz eines einzelnen Elektronenspins in einem Quantenpunkt etabliert, welche im wesentlichen durch die Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und den Kernspins der Umgebung verursacht wird.

Zur Beschreibung der Dekohärenz wird die Echtzeitdynamik im Zentralspinmodell mittels unterschiedlicher numerischer und analytischer Methoden berechnet. Ziel dieser Arbeit ist es, die Anwendbarkeit der Methoden zu verifizieren und mögliche Einschränkungen aufzuzeigen. Eine numerische Untersuchung des quantenmechanischen Zentralspinmodells wird auf Basis der Dichtematrix-Renormierungsgruppe durchgeführt, wodurch die Hyperfeinwechselwirkung zwischen dem Zentral- und den Badspins für beliebige externe Magnetfelder stets vollständig erfasst wird. Eine Beschränkung auf den Limes starker externer Felder ist im Gegensatz zu vielen anderen Methoden nicht erforderlich. Neben einer detaillierten Beschreibung der Implementierung des Algorithmus für ein Cluster von Spins, welches durch einen Zentralspin verbunden wird, liegt ein Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit auf unterschiedliche Erweiterungen der Dichtematrix-Renormierungsgruppe zur Berechnung der Echtzeitentwicklung der Spins. Die exakte Berechnung der Spur der Operatoren im Hochtemperaturlimes erfolgt dabei immer mittels purifizierter Zustände. Beste Ergebnisse erhält man mit der adaptiven Methode, die auf der Trotter-Suzuki-Zerlegung des Zeitentwicklungsoperator basiert. Diese Methode liefert eine hohe Genauigkeit, welche mit einer relativ schnellen Laufzeit des Algorithmus kombiniert wird, so dass Systeme bestehend aus bis zu eintausend Badspins auf kurzen und mittleren Zeitskalen numerisch untersucht werden können.

Motiviert durch die numerischen Ergebnisse für das vollständig quantenmechanische Zentralspinmodell und durch einfache analytische Argumente, wird ein semiklassisches Modell für die Beschreibung der Zentralspindynamik eingeführt. Dabei wird das Bad durch ein klassisches zufällig fluktuierendes Feld ersetzt, während der Zentralspin weiterhin quantenmechanisch beschrieben wird. Das semiklassische Modell wird analytisch im Rahmen der Magnus-Entwicklung („Average Hamiltonian theory“) und mittels einer numerischen Simulation untersucht. Durch den Vergleich mit den quantenmechanischen Resultaten kann so gezeigt werden, dass der quasistatische Limes des Bades bereits in der Größenordnung von eintausend Badspins einsetzt. Außerdem wird die separate Behandlung von Erhaltungsgrößen anhand des erhaltenen Gesamtspins diskutiert, was zu einer spürbaren Verbesserung der numerischen Ergebnisse des semiklassischen Modells führt.

Als Alternative zur vollständig quantenmechanischen und semiklassischen Beschreibung werden die Bewegungsgleichungen des Zentralspinmodells zusätzlich auf klassischem Niveau diskutiert. Anders als im semiklassischen Modell ist in der vollständig klassischen Beschreibung die Berechnung der Badfluktuationen enthalten. Auf kurzen Zeitskalen ergibt sich eine bemerkenswerte Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Dichtematrix-Renormierungsgruppe, so dass der Einfluss von Quantenfluktuationen vernachlässigbar ist. Für große Zeiten gewinnen die Quantenfluktuationen an Einfluss, was zu einer Reduktion der Autokorrelation des Zentralspins im quantenmechanischen Fall führt. Ein vollständiger Zerfall der Autokorrelation für große Zeiten kann ohne jegliches externes Feld nicht beobachtet werden. Bei einem endlichen Magnetfeld hängt die Qualität der klassischen Beschreibung von der Stärke des Feldes ab. Insgesamt suggerieren die Ergebnisse jedoch, dass für große Bäder eine Überstimmung zwischen klassischer und quantenmechanischer Beschreibung erreicht wird.

Zum Abschluss der Arbeit werden die Eigenschaften von optimierten Pulsen, die der Dephasierung des Elektronenspins entgegenwirken, im Rahmen des semiklassischen Modells für unterschiedliche Arten von Rauschen untersucht. Falls die Autokorrelationsfunktion des Rauschens der eines Ornstein-Uhlenbeck-Prozesses ähnelt, so ist die Unterdrückung der Dephasierung mittels optimierter Pulse stark eingeschränkt. Dieses Verhalten kann auf dem Niveau der Magnus-Entwicklung erklärt werden. Durch die Kuspierung in der Autokorrelationsfunktion tritt eine zusätzliche Bedingung auf, welche bei der Optimierung von Pulsen standardmäßig nicht berücksichtigt wird.

Abstract

In the field of quantum information processing, long decoherence times of the quantum bits are essential. Only if sufficiently long computations can be performed, quantum algorithms, which exploit the special properties of a quantum computer, can be implemented successfully. This includes the storage of quantum information as well as the number of performable operations on the quantum bits.

In this thesis, we present a proof-of-principle study of the dynamics of an electron spin in the central spin model where a single spin interacts with a large number of non-interacting bath spins. During the last decade, the central spin model has proven to be a good description of the decoherence of a single electron spin confined in a quantum dot. There, the decoherence is dominated by the hyperfine interaction between the electron spin and the surrounding nuclear spins.

For studying the dynamics in the central spin model, we combine a variety of numerical and analytical tools. A numerical study of the quantum mechanical model is accomplished by the time-dependent density matrix renormalization group. This approach captures the full hyperfine interaction for arbitrary magnetic fields. Thus, it is not restricted to a certain regime such as many other methods. We demonstrate how the algorithm is adopted for a cluster of spins linked by a central spin. An exact calculation of the trace at infinite temperature is achieved by purifying the system. Furthermore, a detailed investigation of several approaches for calcu-

lating the real-time evolution is presented. Best results are obtained from the adaptive method based on the Trotter-Suzuki decomposition of the time-evolution operator. Thereby, systems containing up to thousand bath spins can be studied on short and on intermediate time scales.

Motivated by the results for the quantum model and by simple analytic arguments, a semiclassical description of the central spin problem is introduced. In this description, the spin bath is replaced by a classical fluctuating variable while the central spin is still treated on the quantum level. The semiclassical model is analyzed in the framework of average Hamiltonian theory and numerical simulations. By combining these results with the results from the quantum mechanical model, the convergence towards the static-bath approximation is proven. Furthermore, the numerical simulations reveal that a separate treatment of the conserved quantities is crucial.

In addition, the central spin model is discussed on the level of classical spins comprising a self-consistent calculation of the bath fluctuations. On short time scales, the numerical results for the dynamics of the central spin are in remarkable agreement with the results obtained from the density matrix renormalization group. This implies that the influence of quantum fluctuations is negligible on the corresponding time scales. For larger times, quantum fluctuations arise inducing a slight reduction of the central spin autocorrelation functions. Without external field, the long-time behavior reveals a non-decaying fraction of the central spin. For a finite external field, the quality of the solution determined by the classical equations of motion depends on the regarded regime of the field.

Finally, pulses for pure dephasing are discussed in the framework of a semiclassical model for different types of noise. If the autocorrelation function of the noise resembles the one of an Ornstein-Uhlenbeck process, the Frobenius norm exhibits an unexpected dependence on the inverse pulse amplitude. Based on average Hamiltonian theory, we derive an additional condition which is not fulfilled for pulses derived from the standard conditions.