

Das Quanten-Shannon-McMillan-Breiman-Theorem am Beispiel der Heisenbergschen Spinkette

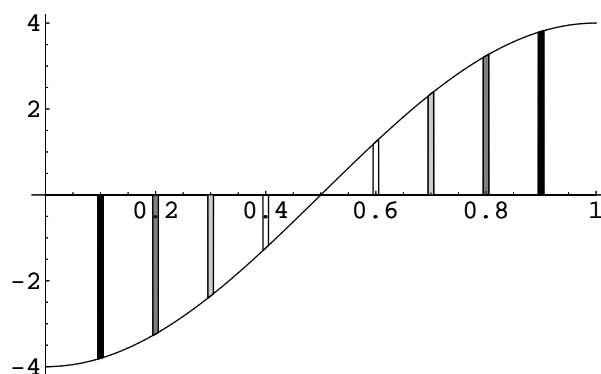
Diplomarbeit

von

Markus Müller

Fakultät II – Mathematik und Naturwissenschaften
Technische Universität Berlin

13. September 2004



Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei Prof. Ruedi Seiler bedanken, der mir als Physikstudent die Möglichkeit gegeben hat, ein interessantes und grundlegendes Problem der Mathematischen Physik zu bearbeiten. Wichtig war für mich nicht nur das große Engagement, mit dem er meine Fragen beantwortet und mich immer mit der passenden Literatur versorgt hat, sondern vor allem auch die Begeisterung für sein Fach, die in den Besprechungen mit ihm immer ansteckend gewirkt hat.

Mein tiefster Dank gilt Arleta Szkoła, Igor Bjelaković, Rainer Siegmund-Schultze und Tyll Krüger, die mir immer mit Rat und Tat zur Seite gestanden haben. Vor allem Igor gebührt mein Dank, der sich teilweise stundenlang Zeit genommen hat, meine Fragen zu beantworten und mit mir über das Thema der Diplomarbeit zu diskutieren. Die gute Atmosphäre und der kollegiale Umgang in der Arbeitsgruppe haben mir den Einstieg sehr erleichtert.

Dank gebührt auch Prof. Andreas Knorr für seine Bereitschaft, die Arbeit als Erstgutachter zu betreuen. Seine unbürokratische Unterstützung in allen Phasen der Diplomarbeit war sehr hilfreich und keineswegs selbstverständlich.

Wibke Baack und Franz-Josef Schmitt danke ich für das fleißige Korrekturlesen, Juliane Rama für den Tee und die moralische Unterstützung und David Gross für die vielen Diskussionen, von denen ich eine Menge lernen konnte. Herzlicher Dank auch an Prof. Karl-Eberhard Hellwig, dem ich den Großteil meines Wissens über Quanteninformationstheorie verdanke, an Christopher Witte für sein wagemutiges Unterfangen, David und mir die Funktionalanalysis näherzubringen, und an Stephan Fischer, Dörthe Winter und Kristina Makedonska für Krisenmanagement in wichtigen Situationen.

Ein herzliches Dankeschön an Prof. Dierk Schleicher, von dem ich weit mehr als nur wissenschaftliches Schreiben gelernt habe, für die gute Zusammenarbeit und jahrelanges Vertrauen und Unterstützung.

Schließlich möchte ich meinen Eltern und meiner kleinen Schwester Janina danken, die mir dieses Studium ermöglicht und mich in jeder Situation unterstützt haben, und ohne die nichts von alledem hier Sinn machen würde.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
1.1	Zusammenfassung	4
1.2	Motivation und Aufbau der Arbeit	5
2	Der klassische Fall	7
2.1	Typische Zustände des Isingmodells ohne Wechselwirkung . . .	7
2.2	Ergodentheorie	10
2.3	Der klassische Shannon-McMillan-Breiman-Satz	13
3	Der quantenmechanische Fall	15
3.1	Mathematische Grundlagen von Quantengittermodellen . . .	15
3.2	Der Quanten-Shannon-McMillan-Satz	17
3.3	Gibbszustände im thermodynamischen Limes	20
4	Anwendung auf die Heisenbergsche Spinkette	26
4.1	Kanonische Näherung auf langen Blöcken	26
4.2	Ergebnis: Äquivalenz der Gesamtheiten	34
4.3	Visualisierung der AEP beim Heisenberg-Modell	36
5	Spinketten-Modelle mit Leiteroperatorenstruktur	38
5.1	Das XY-Modell	39
5.2	Intervalle zur Konstruktion typ. Zustände der XY-Kette . . .	41
5.3	Eine Vermutung über typ. Zustände auf langen Blöcken . . .	43
5.4	Der QSM-Satz und Kombinatorik auf stetigen Funktionen . .	49
A	Hilfssätze und Beweise	53
B	Mathematica-Notebooks	64
C	Notation	69

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Zusammenfassung

Einer der grundlegenden Grenzwertsätze der klassischen Informationstheorie ist der Shannon-McMillan-Breiman-Satz. Er sagt aus, dass bei ergodischen, stationären Prozessen die Folge der Zufallsvariablen mit hoher Wahrscheinlichkeit in einer kleinen Teilmenge aller möglichen Ergebnisse liegt. Innerhalb dieser "typischen" Teilmenge sind alle Elementarereignisse etwa gleich wahrscheinlich.

Wie in [3] gezeigt werden konnte, gilt eine analoge Aussage auch in der Quanteninformationstheorie. Ziel dieser Arbeit ist es, die Konsequenzen dieses "Quanten-Shannon-McMillan-Satzes" für die Statistische Physik zu untersuchen, und zwar am Modell der Heisenbergschen Spinkette.

Anhand einer geeigneten Näherung wird hier gezeigt, dass die typischen Zustände der Spinkette genau die Zustände sind, deren Energie nahe an der inneren Energie u liegt. Wichtigstes Ergebnis ist damit eine exakte Begründung der "Äquivalenz der Gesamtheiten": Das mikrokanonische Ensemble erweist sich gerade als die Restriktion des Gibbszustandes auf den typischen Unterraum, mit der mikroskopischen Gleichverteilung als Folge der AEP¹ des Shannon-McMillan-Satzes.

Zum Abschluss wird die Anwendung der Ergebnisse auf das spezielle Modell der XY-Spinkette diskutiert. Dort zeigt sich ein überraschender Zusammenhang zur klassischen Kombinatorik.

¹ AEP="asymptotic equipartition property" (Eigenschaft der asymptotischen Gleichverteilung)

1.2 Motivation und Aufbau der Arbeit

Die mathematischen Methoden und Modelle der Physik sind nur auf den ersten Blick unabhängig von der gesellschaftlichen und technischen Entwicklung. Trotz ihrer Abstraktion sind viele der Ideen letztlich auf Alltagserfahrungen zurückzuführen.

So war in der Hochphase der klassischen Mechanik die Vorstellung weit verbreitet, die Welt sei eine Art gigantisches Uhrwerk. Im 19. Jahrhundert war es die Dampfmaschine, die das Leben der Menschen grundlegend veränderte, während gleichzeitig der Begriff der Energie in der Physik seine dominante Rolle übernahm.

Spätestens seit Ende des 20. Jahrhunderts entwickelt sich der Computer zu einem Vorbild für die Naturbeschreibung. Die Bedeutung des Informationsbegriffs für die Physik zeigte sich schon vorher in der Statistischen Mechanik. Die *Quanteninformationstheorie* wird in ihrer Entwicklung vor allem durch die Hoffnung vorangetrieben, die seltsame Welt der Quantenmechanik für völlig neue, leistungsfähigere Arten der Informationsverarbeitung zu nutzen.

Gleichzeitig liefert diese Theorie aber auch ein tieferes Verständnis der Grundlagen der Quantenmechanik. In einigen Situationen gelingt es, aus informationstheoretischen Sätzen Aussagen über das Verhalten physikalischer Systeme zu gewinnen. Das ist auch das Ziel dieser Arbeit: Aus dem *informationstheoretischen* Quanten-Shannon-McMillan-Satz Aussagen über die *physikalische* Heisenbergsche Spinkette abzuleiten. Dies geschieht in folgenden Schritten:

- Im zweiten Kapitel wird als einführendes Beispiel das Ising-Modell einer Kette nicht wechselwirkender Spins in einem äußeren Magnetfeld betrachtet. Es wird gezeigt, dass in diesem Modell eine kleine Menge "typischer" Zustände (eines schmalen Energiebereichs) existiert, die asymptotisch volles Gewicht besitzt. Anschließend werden kurz einige Grundlagen des Begriffs der Ergodizität und der klassische Shannon-McMillan-Breiman-Satz vorgestellt.
- Das dritte Kapitel liefert eine Einführung in die Verallgemeinerung dieser Begriffe auf den quantenmechanischen Fall. Zuerst werden die mathematischen Grundlagen von Spingittermodellen dargestellt. Darauf aufbauend werden der Quanten-Shannon-McMillan-Satz und die Definition thermodynamischer Gleichgewichtszustände erläutert.
- Das eigentliche Ergebnis dieser Arbeit ist in Kapitel 4 zu finden. Dort wird mit Hilfe der relativen Entropie gezeigt, dass der globale Gibbszustand auf der Spinkette lokal durch kanonische Zustände approximiert werden kann, ohne die typischen Unterräume wesentlich zu verändern. Die Unterräume können deswegen explizit berechnet werden. Es folgt

eine physikalische Interpretation als "Äquivalenz der Gesamtheiten" und als anschauliches Beispiel eine numerische Visualisierung.

Kapitel 4 beschreibt ganz allgemein *beliebige* eindimensionale Spinketten mit endlichreichweitiger Wechselwirkung².

- In Kapitel 5 erfolgt eine Spezialisierung auf ein ganz bestimmtes Modell, nämlich das der Heisenbergschen XY-Kette mit dem Hamilton-Operator (5.2). Zunächst werden die Grundlagen dieses Modells und seiner Behandlung mit Hilfe von Fermionoperatoren vorgestellt. Danach wird gezeigt, dass die spezielle Form der *Eigenwertdichtefunktion* dazu führt, dass (typische) Zustände gerade durch Vereinigungen von Intervallen gegeben sind.

Anschließend wird eine Vermutung über die Konvergenz von Zuständen auf langen Blöcken formuliert und anhand eines Satzes über die lokale Wirkung der Leiteroperatoren und numerischer Berechnungen plausibel gemacht.

Den Abschluss bildet ein überraschender Zusammenhang zu einer Fragestellung der Kombinatorik, wo der Quanten-Shannon-McMillan-Satz ein Problem löst, das mit Quantenmechanik an sich nichts zu tun hat.

Alle Sätze, die innerhalb dieser Arbeit bewiesen werden, und alle numerischen Berechnungen sind Eigenentwicklungen, mit Ausnahme von Satz 2.2.2 und Satz A.0.5. Wo Argumente übernommen oder nur Beweise anderer Autoren umgebaut worden sind, ist dies im Text kenntlich gemacht.

² Genauer gesagt gelten die Aussagen aus Kapitel 4 für Spinketten mit Wechselwirkungen $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$. Darunter fallen nicht nur Modelle mit Wechselwirkung endlicher Reichweite, sondern auch solche, für die die Wechselwirkung z.B. exponentiell schnell abfällt.

Kapitel 2

Der klassische Fall

Als Einstieg werden in diesem Kapitel zunächst die typischen Zustände einer Ising-Spinkette ohne Wechselwirkung, aber mit äußerem Magnetfeld berechnet. Das Ergebnis erweist sich als Spezialfall des klassischen Shannon-McMillan-Satzes.

2.1 Typische Zustände des Isingmodells ohne Wechselwirkung

In diesem Abschnitt wird ein einfaches Beispiel untersucht, nämlich das Modell einer klassischen Spinkette ohne Wechselwirkung, aber mit äußerem Magnetfeld h . Wie sich später zeigen wird, nimmt dieser einfache Spezialfall des Isingmodells bereits das allgemeine Ergebnis für quantenmechanische Spinketten (siehe Satz 4.2.1) im Wesentlichen vorweg.

Man betrachtet eine Kette aus n klassischen Spins mit Werten $+1$ ("Spin Up") oder -1 ("Spin Down"), d.h. der Konfigurationsraum lautet

$$\Omega_n = \{-1, 1\}^n .$$

Für $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n) \in \Omega_n$ ist die Energiefunktion H_n gegeben durch

$$H_n(\sigma) = -h \sum_{i=1}^n \sigma_i . \quad (2.1)$$

Der Parameter h steht für die Stärke eines externen Magnetfeldes. Wechselwirkungsterme zwischen den Spins, d.h. Beiträge der Form $\prod_{i \in \Lambda} \sigma_i$ mit $|\Lambda| \geq 2$ fehlen vollständig; es handelt sich um eine Spinkette ohne Wechselwirkung. Die Zufallsvariablen $\{\sigma_i\}_{i \in \{1, \dots, n\}}$ sind hier unabhängig, wenn als Wahrscheinlichkeitsverteilung die Boltzmannverteilung

$$P_n(\sigma) = \frac{e^{-\beta H_n(\sigma)}}{Z_n} , \quad Z_n := \sum_{\sigma \in \Omega_n} e^{-\beta H_n(\sigma)}$$

gewählt wird (die Spinkette wird also im kanonischen Ensemble betrachtet).

Wegen der stochastischen Unabhängigkeit kann die Kette als n -fache Kopie einer einzelnen Zufallsvariable $\sigma_0 \in \Omega$ mit $\Omega = \{-1, 1\}$ aufgefasst werden, wobei die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P = (p_0, q_0)$ ebenfalls durch eine Boltzmannverteilung gegeben ist:

$$p_0 := P(\sigma_0 = +1) = \frac{e^{\beta h}}{Z} ,$$

$$q_0 := P(\sigma_0 = -1) = \frac{e^{-\beta h}}{Z} = 1 - p_0 .$$

Die Zustandssumme für den einzelnen Spin beträgt $Z = e^{\beta h} + e^{-\beta h}$. Die dazugehörige Shannon-Entropie lautet

$$s(P) = -p_0 \log p_0 - q_0 \log q_0 .$$

Diese Größe gibt auch die Entropiedichte $\frac{1}{n} S(P_n)$ der Verteilung auf der gesamten Kette an. Man kann sie als Erwartungswert der Zufallsgröße $-\frac{1}{n} \log P_n(X_1, \dots, X_n)$ auffassen:

$$s(P) = E \left(-\frac{1}{n} \log P_n(X_1, \dots, X_n) \right) = -\frac{1}{n} \sum_{X \in \Omega_n} P_n(X) \log P_n(X) .$$

Man definiert nun die *Menge der ϵ -typischen Zustände* $T_\epsilon^{(n)}$ als diejenigen Konfigurationen $\sigma \in \Omega_n$, für die die tatsächliche Größe $-\frac{1}{n} \log P_n(\sigma)$ um weniger als ϵ von diesem Erwartungswert abweicht:

$$T_\epsilon^{(n)} := \left\{ \sigma \in \Omega_n \mid s(P) - \epsilon < -\frac{1}{n} \log P_n(\sigma) < s(P) + \epsilon \right\} . \quad (2.2)$$

Bezeichnet man mit $\uparrow(\sigma)$ die Gesamtzahl der "nach oben gerichteten" Spins in der Konfiguration σ , d.h.

$$\uparrow(\sigma) := \#\{k \in \{1, \dots, n\} \mid \sigma_k = +1\} ,$$

so lassen sich die typischen Zustände des Ising-Modells folgendermaßen charakterisieren:

Satz 2.1.1 (Typische Zustände des Ising-Modells)

Die ϵ -typischen Zustände der Isingkette mit der Energiefunktion (2.1) sind gegeben durch

$$T_\epsilon^{(n)} = \left\{ \sigma \in \Omega_n \mid \uparrow(\sigma) \in \left(\langle \uparrow \rangle - \frac{\epsilon}{2\beta|h|} n , \langle \uparrow \rangle + \frac{\epsilon}{2\beta|h|} n \right) \right\} , \quad (2.3)$$

wobei $\langle \uparrow \rangle = p_0 n$ für den Erwartungswert der Anzahl der "Spins Up" steht, bzw. durch

$$T_\epsilon^{(n)} = \left\{ \sigma \in \Omega_n \mid \frac{1}{n} H_n(\sigma) \in \left(u - \frac{\epsilon}{\beta} , u + \frac{\epsilon}{\beta} \right) \right\} , \quad (2.4)$$

wenn $u = \frac{1}{n} \langle H \rangle = h(q_0 - p_0)$ die innere Energiedichte bezeichnet. Weiterhin gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n \left(T_\epsilon^{(n)} \right) = 1 \quad (2.5)$$

für alle $\epsilon > 0$.

Beweis: Wegen der stochastischen Unabhängigkeit der einzelnen σ_i ist die Wahrscheinlichkeit P_n durch eine Binomialverteilung gegeben, d.h.

$$P_n(\sigma) = p_0^{\uparrow(\sigma)} q_0^{n-\uparrow(\sigma)} .$$

Ist nun $\sigma \in T_\epsilon^{(n)}$, so gilt

$$-\frac{1}{n} \log \left(p_0^{\uparrow(\sigma)} (1-p_0)^{n-\uparrow(\sigma)} \right) \begin{matrix} < \\ > \end{matrix} -p_0 \log p_0 - (1-p_0) \log(1-p_0) \pm \epsilon .$$

Dies ist äquivalent zu

$$\uparrow(\sigma) \begin{matrix} > \\ < \end{matrix} np_0 \pm \frac{\epsilon n}{\log \frac{1-p_0}{p_0}} .$$

Gleichung (2.3) folgt nun aus $\log \frac{q_0}{p_0} = -2\beta h$; Gleichung (2.4) erhält man ebenfalls nach kurzer Rechnung durch Einsetzen von

$$H_n(\sigma) = -2h \uparrow(\sigma) + hn ,$$

was sich durch Abzählen der Spins in Gleichung (2.1) ergibt.

Zu zeigen bleibt Gleichung (2.5). Die Verteilung der Anzahl der "Up-Spins" ist gegeben durch die Binomialverteilung

$$P_n(\uparrow(\sigma) = j) = \binom{n}{j} p_0^j q_0^{n-j} ,$$

und damit beträgt die Varianz dieser Zufallsgröße

$$\text{Var}(\uparrow) = np_0q_0 .$$

Die *Ungleichung von Tschebyschew* liefert

$$P_n \left(T_\epsilon^{(n)} \right) = P_n \left(|\uparrow - np_0| < \frac{\epsilon n}{2\beta|h|} \right) \geq 1 - \frac{\text{Var}(\uparrow)}{\epsilon^2 n^2} 4\beta^2 |h|^2 .$$

Es folgt Gleichung (2.5). □

2.2 Ergodentheorie

In Satz 2.1.1 hat sich gezeigt, dass der Zustand des Ising-Modells für große n mit hoher Wahrscheinlichkeit in einem schmalen Energiebereich lokalisiert ist. Man kann dieses Ergebnis als Spezialfall eines umfassenderen Satzes aus der Informationstheorie betrachten, nämlich des Shannon-McMillan-Breiman-Satzes. Zum Verständnis dieses Satzes sind die mathematischen Grundlagen der *Ergodentheorie* notwendig, von denen in diesem Abschnitt einige in einer kurzen Zusammenfassung erläutert werden. Die Darstellung orientiert sich dabei am Buch von Paul C. Shields ([15]).

Ein *stochastischer Prozess* ist eine Folge $X_1, X_2, \dots, X_n, \dots$ von Zufallsvariablen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (X, Σ, μ) mit $X_i \in A$, wobei das *Alphabet* A als endlich vorausgesetzt wird:

$$\#A < \infty .$$

Für $a_i \in A$ benutzt man die Notation

$$\begin{aligned} a_m^n &:= (a_m, a_{m+1}, \dots, a_n) , \\ A_m^n &= \{(a_m, a_{m+1}, \dots, a_n) \mid a_m, \dots, a_n \in A\} , \\ A^n &= A_1^n . \end{aligned}$$

Die *Verteilungen k -ter Ordnung* μ_k , definiert durch

$$\mu_k(a_1^k) = \text{Prob}(X_1^k = a_1^k) ,$$

müssen die *Konsistenzbedingung*

$$\mu_k(a_1^k) = \sum_{a_{k+1}} \mu_{k+1}(a_1^{k+1})$$

für alle $a_1^k \in A^k$ erfüllen, ansonsten sind sie frei wählbar (bzw. vom zu betrachtenden Modell bestimmt).

Im Modell der Ergodentheorie wird nun zusätzlich eine Transformation $T : X \rightarrow X$ eingeführt, die als eine Art zeitliche Dynamik interpretiert werden kann. Die Transformation T soll *messbar* sein, d.h. das Urbild jeder Borelmenge soll selbst eine Borelmenge sein:

$$B \in \Sigma \implies T^{-1}B \in \Sigma .$$

Die messbare Transformation T heißt *maßerhaltend*, wenn für alle $B \in \Sigma$

$$\mu(B) = \mu(T^{-1}B) ,$$

und sie heißt *ergodisch*, wenn zusätzlich gilt:

$$T^{-1}B = B \implies \mu(B) = 0 \text{ oder } \mu(B) = 1 . \quad (2.6)$$

Die Bedingung (2.6) kann man auch so interpretieren, dass sie die Teilbarkeit des Raumes X in disjunkte, T -invariante Teilmengen X_A, X_B mit endlichem Maß ausschließt. Ist nämlich $X = X_A \cup X_B$ mit $X_A \cap X_B = \{\}$, so dass

$$TX_A \subseteq X_A \quad \text{sowie} \quad TX_B \subseteq X_B ,$$

so folgt

$$X_A = T^{-1}X_A \quad \text{und} \quad X_B = T^{-1}X_B .$$

Ist T ergodisch, so folgt aus (2.6), dass $\mu(X_A) = 0$ und $\mu(X_B) = 1$ ist oder umgekehrt.

Eine der zentralen Aussagen der Ergodentheorie ist der Birkhoffsche Ergodensatz.

Satz 2.2.1 (Der Ergodensatz von Birkhoff)

Sei T eine maßerhaltende, ergodische Transformation auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (X, Σ, μ) , und sei $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ eine messbare Funktion. Dann gilt für fast alle $x \in X$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(T^{i-1}x) \longrightarrow \int f d\mu \equiv E(f)$$

für $n \rightarrow \infty$.

Der **Beweis** ist ebenfalls bei Paul C. Shields ([15]) zu finden.

Interpretiert man den Shift T als Zeitschritt, so lässt sich die Aussage von Satz 2.2.1 als

$$\text{”Zeitmittel} = \text{Ensemblemittel, fast überall”}$$

verstehen¹. Diese Eigenschaft ist als ”Ergodenhypothese” in der Statistischen Mechanik von großer Bedeutung. In dieser Arbeit wird für den späteren Übergang zur Quantenmechanik noch eine Aussage benötigt, die den Zusammenhang zwischen der Ergodizität und der Extremalität von Zuständen zeigt. Anstatt die Transformation T ergodisch bzw. maßerhaltend bezüglich μ zu nennen, kann man auch das Wahrscheinlichkeitsmaß μ als ergodisch bzw. stationär bezüglich des Shifts T bezeichnen.

Satz 2.2.2 (Ergodizität und Extremalität von Maßen)

Sei μ ein stationäres Wahrscheinlichkeitsmaß auf X bezüglich der Transformation T . Dann ist μ genau dann ergodisch, wenn es nicht als Konvexkombination

$$\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2 \tag{2.7}$$

zweier bezüglich T stationärer Maße $\mu_1 \neq \mu_2$ (mit $\alpha \in (0, 1)$) geschrieben werden kann.

¹ (oder auch ”Zeitmittel = Scharmittel”)

Beweis: Angenommen, μ ist stationär, aber nicht ergodisch. Dann gilt $\mu(B) = \mu(T^{-1}B)$ für alle $B \in \Sigma$, und es existiert ein $A \in \Sigma$, so dass $T^{-1}A = A$ mit $0 < \mu(A) < 1$. Sei

$$\mu_1(B) := \frac{\mu(B \cap A)}{\mu(A)}, \quad \mu_2(B) := \frac{\mu(B \cap A^C)}{\mu(A^C)}$$

wobei $A^C = X \setminus A$ das Komplement von A bezeichnet. Dann sind μ_1 und μ_2 stationär, denn

$$\begin{aligned} \mu_1(T^{-1}B) &= \frac{\mu(T^{-1}B \cap A)}{\mu(A)} = \frac{\mu(T^{-1}B \cap T^{-1}A)}{\mu(A)} \\ &= \frac{\mu(T^{-1}(B \cap A))}{\mu(A)} = \frac{\mu(B \cap A)}{\mu(A)} = \mu_1(B) \end{aligned}$$

(die gleiche Rechnung lässt sich für μ_2 durchführen). Wegen

$$\mu = \mu(A)\mu_1 + \mu(A^C)\mu_2$$

ist μ eine Konvexkombination stationärer Maße μ_1 und μ_2 . Stationäre Maße, die nicht ergodisch sind, können also nicht extremal sein.

Um auch die Umkehrung zu sehen, sei angenommen, dass μ ergodisch ist, sich aber trotzdem als Konvexkombination der Form (2.7) schreiben lässt. Wegen $\mu \geq \mu_1$ folgt dann für alle $B \in \Sigma$

$$\mu(B) = 0 \implies \mu_1(B) = 0. \quad (2.8)$$

Da $\mu \neq \mu_1$ gilt, gibt es ein $A \in \Sigma$, so dass

$$\mu(A) \neq \mu_1(A). \quad (2.9)$$

Sei nun die Menge ξ definiert durch

$$\xi := \left\{ x \in X \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_A T^{i-1}(x) \neq \mu(A) \right\}.$$

Nach dem Ergodensatz von Birkhoff (2.2.1) ist $\mu(\xi) = 0$, und damit nach Gleichung (2.8) auch $\mu_1(\xi) = 0$. Wäre nun auch μ_1 ergodisch, so folgte aus dem Birkhoffschen Ergodensatz

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_A T^{i-1}(x) = \mu_1(A) \neq \mu(A)$$

für μ_1 -fast alle $x \in X$. Damit wäre aber $\mu_1(\xi) = 1$, ein Widerspruch.

Also kann μ_1 nicht ergodisch sein. Dann gibt es aber ein $B \in \Sigma$ mit $T^{-1}B = B$, so dass $0 < \mu_1(B) < 1$ gilt. Da μ ergodisch ist, muss $\mu(B) = 0$ gelten, und damit nach Gleichung (2.8) auch $\mu_1(B) = 0$, ein Widerspruch. Ergodische stationäre Maße sind also extremal. \square

2.3 Der klassische Shannon-McMillan-Breiman-Satz

Die Erläuterungen in diesem Abschnitt sind nur als eine kurze Zusammenfassung gedacht. Sie orientieren sich am Buch von Cover und Thomas ([6]). Darin ist eine ausführliche Darstellung mit allen Beweisen zu finden.

Ein für den Shannon-McMillan-Breiman-Satz grundlegender Begriff ist die *Entropierate* H eines stochastischen Prozesses. Sie wird definiert als

$$H = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} H(X_1, X_2, \dots, X_n) , \quad (2.10)$$

wann immer der Grenzwert existiert. Dabei bezeichnet $H(X_1, \dots, X_n)$ die *gemeinsame Entropie* der Zufallsvariablen $\{X_1, \dots, X_N\}$ mit Alphabet \mathfrak{X} , gegeben durch

$$H(X_1, \dots, X_N) = - \sum_{x_1, \dots, x_n \in \mathfrak{X}} p(x_1, \dots, x_n) \log p(x_1, \dots, x_n) . \quad (2.11)$$

Eine verwandte Größe wird definiert durch

$$H' = \lim_{n \rightarrow \infty} H(X_n | X_{n-1}, X_{n-2}, \dots, X_1) , \quad (2.12)$$

wobei die *bedingte Entropie* zweier Zufallsvariablen X und Y mit Alphabet \mathfrak{X} bzw. \mathfrak{Y} definiert ist durch

$$H(X|Y) = - \sum_{x \in \mathfrak{X}} \sum_{y \in \mathfrak{Y}} p(x, y) \log p(y|x) .$$

Für *stationäre* stochastische Prozesse existieren die Grenzwerte in (2.10) und (2.12) immer und stimmen überein, d.h. $H = H'$.

Man kann die Gleichungen (2.10) und (2.11) so interpretieren, dass die Entropierate H gerade dem Erwartungswert von $-\frac{1}{n} \log p$ entspricht, d.h.

$$H = \lim_{n \rightarrow \infty} E \left(-\frac{1}{n} \log p(X_1, \dots, X_n) \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} E (-\log p(X_n | X_{n-1}, \dots, x_1)) .$$

Der Shannon-McMillan-Breiman-Satz sagt nun aus, dass der Ausdruck $-\frac{1}{n} \log p(X_1, \dots, X_n)$ für fast alle Folgen von Ergebnissen tatsächlich gegen diesen Erwartungswert konvergiert:

Satz 2.3.1 (Der Shannon-McMillan-Breiman-Satz)

Ist H die Entropierate eines stationären ergodischen Prozesses $\{X_n\}$ mit endlichem Alphabet \mathfrak{X} , so gilt

$$p \left(-\frac{1}{n} \log p(X_1, \dots, X_n) \longrightarrow H \right) = 1 .$$

Definiert man analog zu Gleichung (2.2) beim Ising-Modell die ϵ -typische Teilmenge $T_\epsilon^{(n)} \subset \mathfrak{X}^n$ für alle $\epsilon > 0$ durch

$$T_\epsilon^{(n)} = \left\{ (x_1, \dots, x_n) \in \mathfrak{X}^n \mid H - \epsilon < -\frac{1}{n} \log p(x_1, \dots, x_n) < H + \epsilon \right\} ,$$

so sagt der Shannon-McMillan-Breiman-Satz aus, dass für große n fast das gesamte Maß auf diese Teilmenge konzentriert ist:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p(T_\epsilon^{(n)}) = 1 . \quad (2.13)$$

Jedes Element aus $T_\epsilon^{(n)}$ hat etwa das Maß e^{-nH} . Wegen $p > e^{-n(H+\epsilon)}$ folgt auch

$$\#T_\epsilon^{(n)} < e^{n(H+\epsilon)} . \quad (2.14)$$

Im Vergleich zur Mächtigkeit aller Ereignisse $|\mathfrak{X}|^n$ ist die Menge $T_\epsilon^{(n)}$ also exponentiell klein. Die Situation ist schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt.

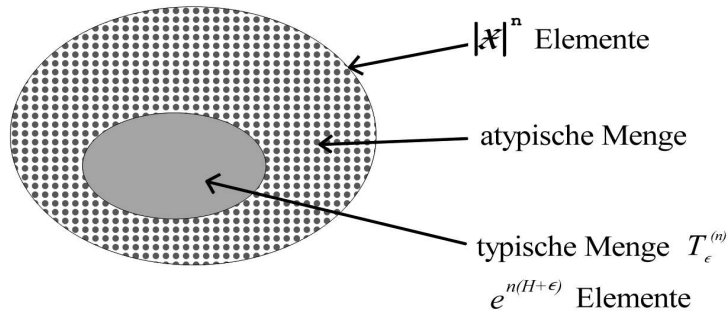


Abbildung 2.1: Typische und atypische Mengen

Die Gleichungen (2.13) und (2.14), zusammen mit der Abschätzung $\#T_\epsilon^{(n)} > (1 - \epsilon)e^{n(H-\epsilon)}$, werden auch als *Shannon-McMillan-Satz* (ohne das Suffix "Breiman") bezeichnet. Der Shannon-McMillan-Breiman-Satz 2.3.1 ist stärker: Er sagt zusätzlich aus, dass fast *jede einzelne Folge* von Ereignissen irgendwann (für ein $n = N$) in $T_\epsilon^{(n)}$ liegt und dort auch bleibt (für alle $n \geq N$).

Die vielleicht wichtigste Konsequenz des Shannon-McMillan-Satzes liegt in der Möglichkeit der Datenkompression: Für große n können die Ergebnisse von stationären, ergodischen Prozessen in durchschnittlich $(H \cdot n / \log 2)$ Bits codiert werden. Für eine ausführlichere Diskussion siehe [6].

Kapitel 3

Der quantenmechanische Fall

3.1 Mathematische Grundlagen von Quantengittermodellen

In diesem Abschnitt wird eine kurze Einführung in den mathematischen Aufbau der Quantengittermodelle gegeben, die sowohl dem Quanten-Shannon-McMillan-Satz als auch der thermodynamischen Behandlung des Heisenbergmodells zugrundeliegen. Dieser Überblick orientiert sich an [3] und [8]. Eine ausführliche Darstellung ist z.B. in dem Buch von O. Bratteli und D. W. Robinson ([5]) zu finden.

Man betrachtet ein ν -dimensionales¹ kubisches Gitter \mathbb{Z}^ν . Zu jedem Gitterplatz $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^\nu$ gehört eine C^* -Algebra $\mathcal{A}_{\mathbf{x}}$, wobei alle $\mathcal{A}_{\mathbf{x}}$ zu einer endlich-dimensionalen C^* -Algebra \mathcal{A} mit Einselement isomorph sind:

$$\mathcal{A}_{\mathbf{x}} = \tau(\mathbf{x})\mathcal{A} . \quad (3.1)$$

Dabei ist $\tau(\mathbf{x})$ ein Isomorphismus. Für endliche Teilmengen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ wird die *lokale Algebra* \mathcal{A}_Λ definiert durch

$$\mathcal{A}_\Lambda := \otimes_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathcal{A}_{\mathbf{x}} .$$

Für Bereiche Λ des Gitters mit endlichem Durchmesser² $\text{diam}(\Lambda)$ beinhaltet \mathcal{A}_Λ alle Observablen auf Λ .

Um eine Algebra auf dem unendlich ausgedehnten Gitter \mathbb{Z}^ν zu bekommen, bildet man *nicht* das unendliche Tensorprodukt $\otimes_{\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^\nu} \mathcal{A}_{\mathbf{x}}$; die resultierende Algebra hätte keine abzählbare Basis mehr und auch sonst mathematisch sehr unangenehme Eigenschaften. Stattdessen bildet man erst die Vereinigung aller lokalen Algebren

$$\mathcal{A}_\infty := \cup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu} \mathcal{A}_\Lambda \quad (3.2)$$

¹Ab Kapitel 4 wird in dieser Arbeit nur noch der Fall $\nu = 1$ betrachtet.

² Der Durchmesser von Λ ist definiert durch $\text{diam}(\Lambda) = \sup_{\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \Lambda} |\mathbf{a} - \mathbf{b}|$.

und nennt dann deren Abschluss bezüglich der Operatornorm die *quasilokale Algebra* \mathcal{A}^∞ :

$$\mathcal{A}^\infty := \overline{\mathcal{A}_\infty} . \quad (3.3)$$

Ein Zustand $\Psi \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ auf der quasilokalen Algebra ist ein normiertes, positives, lineares Funktional auf \mathcal{A}^∞ . Für jedes endliche Gebiet Λ induziert Ψ einen Zustand $\Psi^{(\Lambda)}$ auf \mathcal{A}_Λ durch

$$\Psi^{(\Lambda)} = \Psi \upharpoonright \mathcal{A}_\Lambda . \quad (3.4)$$

Dieser lässt sich eindeutig durch einen *Dichteoperator* $D_{\Psi^{(\Lambda)}}$ darstellen, so dass

$$\Psi^{(\Lambda)}(a) = \text{tr}(a D_{\Psi^{(\Lambda)}})$$

für alle $a \in \mathcal{A}_\Lambda$. Dabei ist für alle $\Lambda \subset \Lambda'$ die *Konsistenzbedingung*

$$\Psi^{(\Lambda)} = \Psi^{(\Lambda')} \upharpoonright \mathcal{A}_\Lambda$$

erfüllt, die sich auch schreiben lässt als

$$D_{\Psi^{(\Lambda)}} = \text{tr}_{\Lambda' \setminus \Lambda} D_{\Psi^{(\Lambda')}} .$$

Hier steht $\text{tr}_{\Lambda' \setminus \Lambda}$ für die partielle Spur über die Differenzmenge.

Jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^\nu$ definiert eine Verschiebung $T(\mathbf{x})$ des Gitters³. Man betrachtet die Menge aller translationsinvarianten Zustände

$$\mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty) := \{ \Psi \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty) \mid \Psi \circ T(\mathbf{x}) = \Psi \text{ für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^\nu \} . \quad (3.5)$$

In Analogie zu klassischen stationären stochastischen Prozessen existiert auch für alle translationsinvarianten Zustände $\Psi \in \mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$ der Grenzwert⁴

$$s(\Psi) := \lim_{\Lambda(\mathbf{n}) \nearrow \mathbb{N}^\nu} \frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} S(\Psi^{(\mathbf{n})}) = - \lim_{\Lambda(\mathbf{n}) \nearrow \mathbb{N}^\nu} \frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} \text{tr}(D_{\Psi^{(\mathbf{n})}} \log D_{\Psi^{(\mathbf{n})}})$$

und wird *mittlere von Neumann-Entropie* des Zustandes Ψ genannt. Dabei steht $\Lambda(\mathbf{n})$ für die Menge

$$\Lambda(\mathbf{n}) := \{ (x_1, \dots, x_\nu) \in \mathbb{Z}^\nu \mid x_i \in \{1, \dots, n_i\} \} .$$

Für $n \in \mathbb{N}$ wird mit $\Lambda(n)$ der ν -dimensionale Hyperwürfel

$$\Lambda(n) := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^\nu \mid \mathbf{x} \in \{1, \dots, n\}^\nu \}$$

³ Die formale Definition der Translation $T(\mathbf{x}) : \mathcal{A}_\Lambda \rightarrow \mathcal{A}_{\Lambda+\mathbf{x}}$ ist gegeben durch $T(\mathbf{x})(a) = (\otimes_{\mathbf{z} \in \Lambda} T_{\mathbf{z}}(\mathbf{x})) a$, mit $T_{\mathbf{z}}(\mathbf{x}) = \tau(\mathbf{x}) \tau^{-1}(\mathbf{z})$. τ ist der Isomorphismus aus (3.1).

⁴ Der thermodynamische Limes $\Lambda \nearrow \mathbb{N}^\nu$ kann entlang einer zunehmenden Folge von Gitterparallelepipeden $(\Lambda(\mathbf{a}_n))_{n \in \mathbb{N}}$ gebildet werden, mit $\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n)_i = \infty$ für alle i .

bezeichnet. Außerdem setzt man $\mathcal{A}^{(n)} := \mathcal{A}_{\Lambda(n)}$ und $\Psi^{(n)} := \Psi^{(\Lambda(n))}$ (entsprechend für Vektoren $\mathbf{n} \in \mathbb{N}^\nu$).

Die Übertragung der klassischen Definition des Begriffs der Ergodizität auf Quantenzustände ergibt sich nun sofort aus Satz 2.2.2: Ein Zustand heißt *ergodisch*, wenn er ein extremaler translationsinvarianter Zustand ist, d.h. in der Menge $\partial_{ex}\mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$ liegt.

Die endlichdimensionale C^* -Algebra $\mathcal{A}^{(\Lambda)}$ ist isomorph zu einer endlichen direkten Summe $\bigoplus_{j=1}^M \mathcal{B}(\mathcal{H}_j^{(\Lambda)})$ von endlichdimensionalen Hilberträumen $\mathcal{H}_j^{(\Lambda)}$. Im folgenden sei stets $\mathcal{H}^{(\Lambda)} := \bigoplus_{j=1}^M \mathcal{H}_j^{(\Lambda)}$. Dann wird insbesondere jeder Minimalprojektor auf $\mathcal{A}^{(\Lambda)}$ durch einen eindimensionalen Projektor auf $\mathcal{H}^{(\Lambda)}$ repräsentiert.

Der mathematische Rahmen für den Quanten-Shannon-McMillan-Satz ist damit abgesteckt. Die weiteren mathematischen Begriffe zur Beschreibung von Wechselwirkungen auf \mathcal{A}^∞ werden in Abschnitt 3.3 eingeführt (siehe dort).

3.2 Der Quanten-Shannon-McMillan-Satz

Die Erweiterung des klassischen Shannon-McMillan-Satzes auf Quantengittersysteme wurde in [3] erarbeitet. Sie soll in diesem Abschnitt ohne Beweis vorgestellt werden.

Satz 3.2.1 (Quanten-Shannon-McMillan-Satz)

Sei Ψ ein ergodischer Zustand auf \mathcal{A}^∞ mit mittlerer Entropie $s(\Psi)$. Dann gibt es für alle $\delta > 0$ ein $\mathbf{N}_\delta \in \mathbb{N}^\nu$, so dass für alle $\mathbf{n} \in \mathbb{N}^\nu$ mit $\Lambda(\mathbf{n}) \supseteq \Lambda(\mathbf{N}_\delta)$ ein Orthogonalprojektor $p^{(\mathbf{n})}(\delta) \in \mathcal{A}^{(\mathbf{n})}$ existiert, so dass

1. $\Psi^{(\mathbf{n})}(p^{(\mathbf{n})}(\delta)) \geq 1 - \delta$,
2. für alle Minimalprojektoren $p \in \mathcal{A}^{(\mathbf{n})}$ mit $p \leq p^{(\mathbf{n})}(\delta)$ gilt

$$e^{-\#\Lambda(\mathbf{n})(s(\Psi)+\delta)} < \Psi^{(\mathbf{n})}(p) < e^{-\#\Lambda(\mathbf{n})(s(\Psi)-\delta)},$$

3. $e^{\#\Lambda(\mathbf{n})(s(\Psi)-\delta)} < \text{tr}_{\mathbf{n}}(p^{(\mathbf{n})}(\delta)) < e^{\#\Lambda(\mathbf{n})(s(\Psi)+\delta)}$.

In Analogie zum klassischen Shannon-McMillan-Satz kann man diesen Satz so interpretieren, dass der n -Block-Zustand des Quantengittersystems im Wesentlichen auf einen exponentiell kleinen, "typischen Unterraum" U konzentriert ist. Dieser Begriff ist das Quanten-Analogon zum klassischen Begriff der "typischen Menge" (von Ereignissen). Dabei ist $p^{(\mathbf{n})}(\delta)$ der Orthogonalprojektor auf U , $\text{tr}_{\mathbf{n}}(p^{(\mathbf{n})}(\delta))$ gibt die Dimension von U an, und die Minimalprojektoren $p \leq p^{(\mathbf{n})}(\delta)$ sind eindimensionale Projektoren auf Teilräume von U , die als Gegenstück zu den klassischen "Elementarereignissen" aufgefasst werden können.

Nach Punkt 1 hat U fast volles Maß. Punkt 2 sagt, dass die Wahrscheinlichkeit von Minimalprojektoren auf U annähernd gleichverteilt ist, mit

$$-\frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} \log \Psi^{(\mathbf{n})}(p) \in (s(\Psi) - \delta, s(\Psi) + \delta) .$$

Gemäß Punkt 3 hat U exponentiell kleine Dimension im Vergleich zum gesamten Hilbertraum.

Eine formale Definition des Begriffs des typischen Unterraums kann folgendermaßen erfolgen (in Anlehnung an [11], S. 542):

Definition 3.2.2 (Typische Unterräume im Quantenfall)

Sei (ω_Λ) eine Familie von Zuständen⁵ auf $(\mathcal{A}^{(\Lambda)})_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu}$, für die der Grenzwert

$$s := \lim_{\Lambda(\mathbf{n}) \nearrow \mathbb{N}^\nu} \frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} S(\omega_{\Lambda(\mathbf{n})})$$

existiert⁶, wobei $S(\omega_n) = -\text{tr}(D_{\omega_n} \log D_{\omega_n})$ für die von Neumann-Entropie eines Zustands ω_n steht. Der δ -typische Unterraum $T_\delta^{\omega_\Lambda} \subset \mathcal{H}^{(\Lambda)}$ von ω_Λ wird dann definiert durch

$$T_\delta^{\omega_\Lambda} := \text{span} \left\{ U \text{ Eigenraum von } D_{\omega_\Lambda} \mid \lambda(U) \in \left(e^{-n(s+\delta)}, e^{-n(s-\delta)} \right) \right\} ,$$

wobei $\lambda(U)$ den zu U gehörigen Eigenwert bezeichnet.

Der typische Projektor $p^{(\mathbf{n})}(\delta)$ aus Satz 3.2.1 kann so gewählt werden, dass er in den typischen Unterraum $T_\delta^{\Psi^{(\mathbf{n})}}$ von $\Psi^{(\mathbf{n})}$ projiziert. Das folgt aus der Konstruktion von $p^{(\mathbf{n})}(\delta)$ in [3].

Bei Satz 3.2.1 handelt es sich zunächst um *keine* direkte Verallgemeinerung des Shannon-McMillan-Breiman-Satzes 2.3.1. Das Suffix "Breiman" steht im klassischen Fall für die *punktweise* Konvergenz in dem Sinn, dass fast *jede einzelne Folge* von Ereignissen irgendwann in der typischen Menge liegt und dort bleibt, siehe auch Abschnitt 2.3.

Im Quantenfall ist eine "Folge von Ereignissen" aber ein problematischer Begriff. Um ein analoges Resultat in der Quantentheorie zu erhalten, muss der klassische Shannon-McMillan-Breiman-Satz zunächst umformuliert werden. Das ist auch der erste Schritt in [4]:

Definition 3.2.3 (Bedingungen B und B^*)

Sei P ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf $[A^{\mathbb{Z}}, \mathfrak{A}^{\mathbb{Z}}]$, wobei A eine endliche Menge und $\mathfrak{A}^{\mathbb{Z}}$ die durch die Zylindermengen generierte σ -Algebra ist. Dann

⁵ Es wird *nicht* vorausgesetzt, dass die ω_Λ eine Konsistenzbedingung der Form $\omega_\Lambda = \omega_{\Lambda'} \upharpoonright \mathcal{A}_\Lambda$ für $\Lambda \subset \Lambda'$ erfüllen.

⁶ Die Existenz des Grenzwertes ist gewährleistet, wenn es sich bei ω_Λ um die Einschränkung eines globalen translationsinvarianten Zustandes $\omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ auf $\mathcal{A}^{(\Lambda)}$ handelt. Die Definition wird hier allgemeiner gehalten, um auch für die lokalen kanonischen Zustände Ψ_n den Begriff des typischen Unterraums festlegen zu können.

erfüllt P die Bedingung (B) bezüglich $h > 0$, wenn für P -fast alle Folgen $(\xi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ der Grenzwert $-\frac{1}{n} \log P^{(n)}(\xi_1, \dots, \xi_n)$ existiert und gleich h ist.

Die Verteilung P erfüllt Bedingung (B^*) bezüglich $h > 0$, wenn für jedes $\epsilon > 0$ eine Folge $(C_\epsilon^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ von Teilmengen von $A^{(n)}$ und ein $N_\epsilon \in \mathbb{N}$ existiert, so dass

1. $C_\epsilon^{(n)} = \left(C_\epsilon^{(n+1)} \right)_b$ für alle $n \in \mathbb{N}$,
2. $\#C_\epsilon^{(n)} \in (e^{n(h-\epsilon)}, e^{n(h+\epsilon)})$ für alle $n \geq N_\epsilon$,
3. $P^{(n)}(x_1, \dots, x_n) < e^{-n(h-\epsilon)}$ für alle $n \geq N_\epsilon$ und $(x_1, \dots, x_n) \in C_\epsilon^{(n)}$,
4. $P^{(n)}(C_\epsilon^{(n)}) > 1 - \epsilon$.

Dabei steht das Symbol b für das Streichen des letzten Eintrags einer Folge, d.h.

$$(\xi_1, \dots, \xi_{n-1}, \xi_n)_b = (\xi_1, \dots, \xi_{n-1}).$$

Satz 3.2.4 (Äquivalenz von B und B^*)

Ein Wahrscheinlichkeitsmaß P auf $[A^{\mathbb{Z}}, \mathfrak{A}^{\mathbb{Z}}]$ erfüllt (B) genau dann, wenn es (B^*) erfüllt.

Die Aussage des klassischen Shannon-McMillan-Breiman-Satzes 2.3.1 ist die, dass stationäre ergodische Prozesse mit endlichem Alphabet Bedingung (B) erfüllen - oder eben, dass sie (B^*) erfüllen, was äquivalent dazu ist.

Auf der Basis von (B^*) wird in [4] nun eine Quantenversion des Breiman-Satzes gezeigt (der Einfachheit halber nur für den eindimensionalen Fall):

Satz 3.2.5 (Der Quanten-Shannon-McMillan-Breiman-Satz)

Sei Ψ ein ergodischer Zustand auf \mathcal{A}^∞ mit mittlerer Entropie s . Dann gibt es für alle $\epsilon > 0$ eine Folge von Orthogonalprojektoren $(p_\epsilon^{(n)})_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{A}^{(n)}$ und ein $N_\epsilon \in \mathbb{N}$, so dass gilt

1. $p_\epsilon^{(n)} = R \left(\text{tr}_{n+1} \left(p_\epsilon^{(n+1)} \right) \right)$,
2. $\text{tr} \left(p_\epsilon^{(n)} \right) \in (e^{n(s-\epsilon)}, e^{n(s+\epsilon)})$ für alle $n \geq N_\epsilon$,
3. es existieren Minimalprojektoren $p_i \in \mathcal{A}^{(n)}$ mit $p_\epsilon^{(n)} = \sum_{i=1}^{\text{tr}(p_\epsilon^{(n)})} p_i$ und $\Psi^{(n)}(p_i) < e^{-n(s-\epsilon)}$ für $n \geq N_\epsilon$,
4. $\Psi^{(n)} \left(p_\epsilon^{(n)} \right) > 1 - \epsilon$.

Dabei steht $R(A)$ für den Bildprojektor des selbstadjungierten Operators A .

Das Streichen des letzten Eintrags wird im Quantenfall also durch das Bilden der partiellen Spur erledigt. Dadurch kann aus einem typischen Projektor auf $\mathcal{A}^{(n+1)}$ ein solcher auf $\mathcal{A}^{(n)}$ konstruiert werden. Die typischen Unterräume sind in diesem Sinn miteinander "verkettet".

Ist die zugrundeliegende Algebra \mathcal{A} abelsch, so reduziert sich die Aussage dieses Satzes auf den klassischen Shannon-McMillan-Breiman-Satz.

3.3 Gibbszustände im thermodynamischen Limes

Aufbauend auf den mathematischen Grundlagen für Quantengittersysteme aus Abschnitt 3.1 werden in diesem Abschnitt der Begriff der *Wechselwirkung* und die verschiedenen Charakterisierungen der thermodynamischen Gibbs-Zustände eingeführt. Es handelt sich nur um eine kurze Zusammenfassung. Eine ausführliche Diskussion mit allen Beweisen ist z.B. in [5] und in [16] zu finden.

Jeder endlichen Teilmenge $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ wird ein selbstadjungiertes Element $\Phi(\Lambda)$ der entsprechenden Algebra \mathcal{A}_Λ zugeordnet. Physikalisch stellt $\Phi(\Lambda)$ die Wechselwirkungsenergie der Teilchen in Λ dar. Man fordert zusätzlich die *Translationsinvarianz* der Wechselwirkung

$$\Phi(\Lambda + a) = \tau_a(\Phi(\Lambda))$$

für alle endlichen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ und alle $a \in \mathbb{Z}^\nu$.

Mit Hilfe der Wechselwirkung Φ kann auf allen endlichen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ der *lokale Hamilton-Operator* H_Λ gebildet werden durch

$$H_\Lambda = H_\Lambda(\Phi) = \sum_{X \subset \Lambda} \Phi(X) . \quad (3.6)$$

Es werden also nur die Beiträge innerhalb von Λ berücksichtigt. Wechselwirkungsterme zwischen Λ und Λ^C , d.h. Terme $\Phi(X)$ für $X \cap \Lambda \neq \{\}$ und $X \cap \Lambda^C \neq \{\}$, werden dabei nicht mit einbezogen. Aus diesem Grund nennt man (3.6) auch den Hamilton-Operator mit *offenen Randbedingungen*.

Für jedes endliche $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ bezeichnet die *Randenergie* $W_\Phi(\Lambda)$ die Summe der Wechselwirkungsenergien zwischen dem Gebiet Λ und dem Außenraum Λ^C , d.h.

$$W_\Phi(\Lambda) = \sum_{X \not\subset \Lambda \wedge X \not\subset \Lambda^C} \Phi(X) . \quad (3.7)$$

Mit Hilfe des lokalen Hamilton-Operators können für jede inverse Temperatur $\beta \in \mathbb{R}$ auf endlichen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu$ die *lokalen Gibbszustände* Ψ_Λ (auch *lokale kanonische Zustände* genannt) definiert werden. Ihr Dichteoperator wird definiert als

$$D_{\Psi_\Lambda} := \frac{e^{-\beta H_\Lambda}}{\text{tr}(e^{-\beta H_\Lambda})} . \quad (3.8)$$

Die Menge der translationsinvarianten Wechselwirkungen kann man mit verschiedenen Normen versehen. Für diese Arbeit ist vor allem die Norm $\|\Phi\|^{(r)}$ wichtig, gegeben durch

$$\|\Phi\|^{(r)} = \sum_{X \ni 0} e^{r(|X|-1)} \|\Phi(X)\| ,$$

eine andere Norm $|||\Phi|||$ ist definiert durch

$$|||\Phi||| = \sum_{X \ni 0} |X|^{-1} \|\Phi(X)\| .$$

Mit $\mathfrak{B}^{(r)}$ bzw. \mathfrak{B} wird die Menge aller translationsinvarianten Wechselwirkungen Φ bezeichnet, für die $\|\Phi\|^{(r)}$ bzw. $|||\Phi|||$ endlich ist. Das ist insbesondere dann der Fall, wenn Φ *endliche Reichweite* besitzt, d.h. wenn es ein $N \in \mathbb{N}$ gibt, so dass $\Phi(\Lambda) = 0$ für alle $|\Lambda| > N$.

Satz 3.3.1 (Existenz der freien und inneren Energiedichte)

Ist $\Phi \in \mathfrak{B}$, so existiert die sog. "pressure"

$$p(\Phi, \beta) := \lim_{\Lambda(\mathbf{n}) \nearrow \mathbb{N}^\nu} \frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} \log \operatorname{tr} \left(e^{-\beta H_{\Lambda(\mathbf{n})}} \right) ,$$

und damit auch die freie Energiedichte $f(\Phi, \beta) = -\beta^{-1} p(\Phi, \beta)$. Für jeden translationsinvarianten Zustand $\omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ existiert ausserdem die innere Energiedichte

$$u(\omega) = \lim_{\Lambda(\mathbf{n}) \nearrow \mathbb{N}^\nu} \frac{1}{\#\Lambda(\mathbf{n})} \operatorname{tr} \left(D_{\Psi_{\Lambda(\mathbf{n})}} H_{\Lambda(\mathbf{n})} \right) .$$

Die Definition für Gibbszustände funktioniert in der Form (3.8) nur auf den lokalen Algebren \mathcal{A}_Λ . Um auch auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ Gleichgewichtszustände zu definieren, gibt es drei verschiedene Möglichkeiten der Charakterisierung, die sich für den eindimensionalen Fall mit endlichreichweitiger Wechselwirkung alle als äquivalent erweisen:

- die KMS-Bedingung,
- die Gibbs-Bedingung,
- das Variationsprinzip (thermodynamische Stabilität).

Die Definition eines *KMS-Zustandes* wird motiviert durch die formale Ähnlichkeit der Zeitentwicklung einer Observablen A im Heisenbergbild

$$\tau_t(A) = e^{itH} A e^{-itH} \tag{3.9}$$

mit der Gestalt der lokalen Gibbszustände in Gleichung (3.8). Damit können in endlichdimensionalen Matrixalgebren die Gibbszustände (3.8) folgendermaßen charakterisiert werden (ohne Beweis):

Satz 3.3.2 (KMS-Bedingung im Endlichdimensionalen)

Sei H ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$, und sei $\rho_H(A) = \operatorname{tr}(Ae^{-H})/\operatorname{tr}(e^{-H})$. Dann gilt

$$\rho(AB) = \rho(B\tau_i(A)) \tag{3.10}$$

für alle $A, B \in \mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$, und jeder Zustand ρ , der (3.10) erfüllt, ist gleich ρ_H .

Setzt man $F_{A,B}(t) := \rho(\tau_t(A)B)$, so gilt für alle selbstadjungierten $A, B \in \mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$ und $t \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} F_{A,B}(-i+t) &= \rho(\tau_{-i+t}(A)B) \\ &= \rho(B\alpha_i(\tau_{-i+t}(A))) \\ &= \rho(B\tau_t(A)) , \end{aligned}$$

wenn ρ die KMS-Bedingung (3.10) erfüllt. Dies legt folgende Definition auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ nahe:

Definition 3.3.3 (KMS-Bedingung auf der quasilokalen Algebra)

Sei τ_t eine starkstetige⁷ einparametrische Automorphismengruppe auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ , und sei $\beta \in \mathbb{R}$ beliebig. Ein Zustand $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ heißt (τ, β) -KMS-Zustand, wenn es für alle $A, B \in \mathcal{A}^\infty$ eine holomorphe⁸ Funktion $F_{A,B} : S_\beta \rightarrow \mathbb{C}$ gibt, die

$$F_{A,B}(t) = \rho(\tau_t(A)B)$$

und

$$F_{A,B}(t - i\beta) = \rho(B\tau_t(A))$$

erfüllt. Dabei ist S_β gegeben durch

$$\begin{aligned} S_\beta &= \{z \in \mathbb{C} \mid 0 \leq \operatorname{Im}z \leq -\beta\} \text{ für } \beta \leq 0 \\ &= \{z \in \mathbb{C} \mid -\beta \leq \operatorname{Im}z \leq 0\} \text{ für } \beta \geq 0 . \end{aligned}$$

Um nun die Gibbs-Bedingung zu formulieren, benötigt man den Begriff der *inneren Störung* eines Zustands. Der Begriff soll hier ohne die genaue (sehr technische) Definition am endlichdimensionalen Fall einer Matrixalgebra $\mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$ motiviert werden. Nach Satz 3.3.2 ist der Gibbs-Zustand ω , für $\beta = 1$ gegeben durch

$$\omega(A) = \frac{\operatorname{tr}(e^{-H}A)}{\operatorname{tr}(e^{-H})} ,$$

der einzige Zustand auf $\mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$, der die KMS-Bedingung (3.10) für die Zeitentwicklung (3.9) erfüllt. Ist $P \in \mathcal{B}(\mathbb{C}^n)$ ein selbstadjungierter Operator, so ist die "Störung" τ_t^P der Zeitentwicklung τ_t definiert durch

$$\tau_t^P(A) = e^{it(H+P)} A e^{-it(H+P)} .$$

Die Störung besteht also in der Addition von P zum Hamilton-Operator. Dann ist der gestörte Zustand

$$[\omega^P](A) = \frac{\operatorname{tr}(e^{-(H+P)}A)}{\operatorname{tr}(e^{-(H+P)})}$$

⁷ (d.h. die Abbildung $t \mapsto \tau_t(A)$ ist für alle A stetig bzgl. der Operatornorm)

⁸ F heißt *holomorph* in S_β , wenn F auf S_β stetig und für $\beta \neq 0$ im Inneren von S_β analytisch ist.

entsprechend der einzige Zustand, der für die gestörte Zeitentwicklung τ^P die KMS-Bedingung (3.10) erfüllt.

Eine analoge Definition kann für die Störung eines Zustands auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ getroffen werden. Dort gibt es zwar keinen "globalen" Hamilton-Operator H , aber für jeden Zustand $\omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$, der $\omega(A) > 0$ für alle $A \geq 0$ mit $A \neq 0$ erfüllt, kann man einen Automorphismus τ finden, so dass ω ein (τ, β) -KMS-Zustand ist. Eine Störung τ^P kann man mit Hilfe des infinitesimalen Generators der Automorphismengruppe definieren. Den gestörten Zustand $[\omega^P]$ definiert man dann als den zugehörigen (τ^P, β) -KMS-Zustand⁹.

Definition 3.3.4 (Gibbs-Bedingung)

Sei $\beta \neq 0$ und $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$. Ein Zustand $\omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ erfüllt die Gibbs-Bedingung für Φ bei der inversen Temperatur β , wenn gilt

1. $\omega(A) > 0$ für alle $A \geq 0$ mit $A \neq 0$,
2. für jedes endliche $\Lambda \subset \mathbb{Z}^{\nu}$ hat die innere Störung $[\omega^{-\beta W_\Phi(\Lambda)}]$ die Form

$$[\omega^{-\beta W_\Phi(\Lambda)}] = \Psi_\Lambda \otimes \tilde{\omega}$$

auf $\mathcal{A}_\Lambda \otimes \mathcal{A}_{\Lambda^c}$, wobei Ψ_Λ der lokale Gibbszustand aus Gleichung (3.8) und $W_\Phi(\Lambda)$ die Randenergie aus Gleichung (3.7) bezeichnet.

Die Idee dieser Definition besteht darin, die Randwechselwirkung $W_\Phi(\Lambda)$ des Gebietes Λ mit seiner Umgebung sozusagen "abzuschalten". Der resultierende Zustand sollte auf dem isolierten Gebiet Λ dann dem lokalen Gibbszustand Ψ_Λ entsprechen.

Die letzte der drei Charakterisierungsmöglichkeiten für Gibbszustände auf der quasilokalen Algebra besteht in einem Variationsprinzip. Dieses Verfahren ist sehr anschaulich, da es gerade das Prinzip der Entropiemaximierung aus der Thermodynamik aufgreift. Der Ausgangspunkt ist die folgende Aussage über die freie Energiedichte für Wechselwirkungen $\Phi \in \mathfrak{B}$:

Satz 3.3.5 (Formel für die freie Energiedichte)

Ist $\Phi \in \mathfrak{B}$, so gilt für die "pressure"

$$p(\beta, \Phi) = \sup_{\omega \in \mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)} (s(\omega) - \beta u(\omega)) \ ,$$

wobei $\mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$ die Menge aller translationsinvarianten Zustände auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ bezeichnet.

⁹ Der Zustand $[\omega^P]$ ist durch diese Forderung nicht eindeutig festgelegt, da es im allgemeinen mehrere KMS-Zustände zu einer Automorphismengruppe τ gibt. Die technische Definition für $[\omega^P]$, wie sie z.B. in [5] zu finden ist, konstruiert aber die (eindeutige) Abbildung $\gamma_\tau^P : \omega \mapsto [\omega^P]$ als einen Isomorphismus der (τ, β) -KMS-Zustände in die (τ^P, β) -KMS-Zustände, der extreme Zustände auf extreme Zustände abbildet.

Diejenigen Zustände, für die der Ausdruck $(s - \beta u)$ sein Maximum annimmt, werden als "thermodynamisch stabil" bezeichnet:

Definition 3.3.6 (Thermodynamisch stabile Zustände)

Ein translationsinvarianter Zustand $\omega \in \mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$ auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞ heißt thermodynamisch stabil für die Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}$, wenn¹⁰

$$p(\beta, \Phi) = s(\omega) - \beta u(\omega) .$$

Für Wechselwirkungen $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$ erweisen sich alle drei Charakterisierungen als äquivalent:

Satz 3.3.7 (Äquivalenz der Charakterisierungen der Gibbszustände)

Sei $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$ für ein beliebiges $r > 0$, und sei τ^Φ die zugeordnete Automorphismengruppe¹¹ auf \mathcal{A}^∞ . Für alle $\beta \in \mathbb{R}$ und alle translationsinvarianten Zustände $\omega \in \mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$ sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- ω ist ein (τ^Φ, β) -KMS-Zustand,
- ω erfüllt die Gibbsbedingung für Φ bei der inversen Temperatur β ,
- ω ist thermodynamisch stabil.

Im allgemeinen gibt es mehrere solcher Gibbszustände zu einer Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$; dies entspricht den verschiedenen "Phasen" des Modells. Wie Araki 1974 gezeigt hat, existiert im eindimensionalen Fall unter einer weiteren, schwachen Voraussetzung aber ein eindeutiger Gibbszustand. Sei $\mathfrak{B}_1^{(r)}$ die Menge aller *eindimensionalen* Wechselwirkungen $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$, für die zusätzlich gilt:

$$\sum_{X \ni 0} \frac{\text{diam}(X)}{|X|} \|\Phi(X)\| < \infty . \quad (3.11)$$

Dabei bezeichnet $\text{diam}(X) = \sup_{\mathbf{a}, \mathbf{b} \in X} |\mathbf{a} - \mathbf{b}|$ den Durchmesser von $X \subset \mathbb{Z}$. Dann gilt folgende Aussage:

Satz 3.3.8 (Eindeutigkeit des Gibbszustandes)

Sei $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ für ein beliebiges $r > 0$. Dann gibt es für jede inverse Temperatur $\beta \in \mathbb{R}$ einen eindeutigen Gibbszustand.

In den folgenden Kapiteln wird immer $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ vorausgesetzt und der dazugehörige Gibbszustand Ψ untersucht. Insbesondere soll der Quanten-Shannon-McMillan-Satz auf diesen Zustand angewendet werden; notwendige Voraussetzung dafür ist aber die Ergodizität von Ψ .

¹⁰ Diese Gleichung ist in der Gestalt $F = U - TS$ aus der Thermodynamik bekannt.

¹¹ Diese ist definiert durch $\tau^\Phi = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^\nu} \tau_\Lambda^\Phi$, wobei $\tau_\Lambda^\Phi(A) = e^{itH_\Lambda} A e^{-itH_\Lambda}$.

Satz 3.3.9 (Ergodizität und Randenergie)

Ist $\Psi \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ der Gibbszustand zu einer Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$, so gilt

- Ψ ist ergodisch,
- die maximale Randenergie $E_r(\Phi) := \sup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu} \|W_\Phi(\Lambda)\|$ ist endlich.

Beide Eigenschaften werden sich bei der Charakterisierung der typischen Unterräume als nützlich erweisen. Ein weiteres wichtiges Werkzeug ist die *relative Entropie*. Für zwei Zustände auf einer endlichdimensionalen C^* -Algebra ist sie definiert durch

$$S(\phi, \psi) := S(D_\phi, D_\psi) = \begin{cases} \text{tr}(D_\phi(\log D_\phi - \log D_\psi)) & \text{falls } \text{supp}(\phi) \leq \text{supp}(\psi) \\ +\infty & \text{andernfalls .} \end{cases}$$

Die relative Entropie ist immer positiv, und sie ist nur dann Null, wenn $\phi = \psi$ ist. Man kann sie daher als eine Art Abstandsmaß für Zustände auffassen. Da sie aber weder Symmetrie noch die Dreiecksungleichung erfüllt, handelt es sich um keine Metrik im eigentlichen Sinn. Die relative Entropie kann ganz allgemein auf beliebigen C^* -Algebren definiert werden (siehe [5]). Für Zustände $\chi, \omega \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ auf der quasilokalen Algebra ist sie gegeben durch

$$S(\chi, \omega) = \sup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^\nu} S(\chi_\Lambda, \omega_\Lambda) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{N}^\nu} S(\chi_\Lambda, \omega_\Lambda)$$

mit $\chi_\Lambda = \chi \upharpoonright \mathcal{A}_\Lambda$ und $\omega_\Lambda = \omega \upharpoonright \mathcal{A}_\Lambda$.

Eine Ungleichung, die die relative Entropie und die innere Störung von Zuständen miteinander verbindet, ist

$$S(\omega, [\omega^h]) \leq 2\|h\|$$

wenn $h = h^*$ und $\omega(A) > 0$ für alle $A \geq 0$ mit $A \neq 0$ (vgl. [8] oder [5]).

Da für Wechselwirkungen $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ also ein eindeutiger, ergodischer Gibbszustand existiert, sind die Voraussetzungen für eine Anwendung des Quanten-Shannon-McMillan-Satzes auf das Heisenbergmodell in jeder Hinsicht erfüllt.

Kapitel 4

Anwendung auf die Heisenbergsche Spinkette

4.1 Kanonische Näherung auf langen Blöcken

Bei dem Versuch, die typischen Zustände der Heisenbergschen Spinkette zu charakterisieren, ergibt sich zunächst eine technische Schwierigkeit: Im Quanten-Shannon-McMillan-Satz wird der Zustand Ψ auf der quasilokalen Algebra (in dieser Arbeit ist das der Gibbszustand der Spinkette) immer *eingeschränkt auf ein Gebiet der Länge n* betrachtet, d.h. man wählt Blöcke der Länge n und betrachtet darauf die Restriktion

$$\Psi^{(n)} = \Psi \upharpoonright \mathcal{A}_{\Lambda(n)} . \quad (4.1)$$

Dieser Blockzustand $\Psi^{(n)}$ ist nun *selbst kein Gibbszustand*. Das führt zu folgenden Schwierigkeiten:

- Für analytische Berechnungen ist unklar, wie $\Psi^{(n)}$ genau aussieht; der Zustand lässt sich nicht explizit hinschreiben wie etwa der Gibbszustand.
- Die direkte Implementation von Gleichung (4.1) bei numerischen Berechnungen ist sehr aufwändig und ineffizient. Dazu müsste man die (unendlich lange) Spinkette durch eine Kette der Länge $N \gg n$ nähern, darauf die Dichtematrix des kanonischen Zustandes

$$D_{\Psi_N} = \frac{e^{-\beta H_N}}{\text{tr}(e^{-\beta H_N})}$$

berechnen, und anschließend durch partielle Spurbildung

$$D_{\Psi^{(n)}} = \text{tr}_{\Lambda(N) \setminus \Lambda(n)} D_{\Psi_N} ,$$

eine Näherung für $\Psi^{(n)}$ bestimmen.

Die Vermutung ist naheliegend, dass die Blockzustände $\Psi^{(n)}$ für große n durch die lokalen Gibbszustände approximiert werden können:

$$D_{\Psi^{(n)}} \approx \frac{e^{-\beta H_n}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})} . \quad (4.2)$$

Doch in welchem Sinn genau darf hier die Näherung (4.2) verwendet werden, wenn das Ziel in der Charakterisierung der typischen Zustände der Spinkette besteht?

Um diese Frage zu beantworten, wird hier ein "physikalischer" Quanten-Shannon-McMillan-Satz für die lokalen Gibbszustände auf der Heisenbergkette formuliert, der bis auf einen Punkt direkt aus der Arbeit von Hiai und Petz [8] folgt:

Satz 4.1.1 (QSM-Satz für die lokalen Gibbszustände)

Seien $\Psi \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ bzw. $\Psi_n \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^{(n)})$ der globale bzw. lokale Gibbszustand zu der Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ mit mittlerer Entropie s . Dann gibt es für alle $\delta > 0$ ein $N_\delta \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_\delta$ ein orthogonaler Projektor¹ $p_n(\delta) \in \mathcal{A}^{(n)}$ existiert mit

1. $\Psi_n(p_n(\delta)) \geq 1 - \delta$,
2. für alle Minimalprojektoren $p \in \mathcal{A}^{(n)}$ mit $p \leq p_n(\delta)$

$$e^{-n(s+\delta)} < \Psi_n(p) < e^{-n(s-\delta)} ,$$

3. $e^{n(s-\delta)} < \text{tr}_n(p_n(\delta)) < e^{n(s+\delta)}$.

Beweis: In Satz 3.3 in [8] wird für beliebige Zustände χ auf einer Matrixalgebra M die Größe

$$\beta_\kappa(\chi) := \min\{\log \text{tr}(q) : q \in M \text{ Projektor} , \chi(q) \geq 1 - \kappa\}$$

eingeführt. Aus diesem Satz geht dann hervor, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \beta_\kappa(\Psi_n) = s \quad (4.3)$$

für alle $0 < \kappa < 1$.

Um die Behauptung zu beweisen, kann ein Argument aus [3] modifiziert werden (siehe dort Lemma 3.3.). Sei $q_{\kappa,n}$ ein Projektor mit $\Psi_n(q_{\kappa,n}) \geq 1 - \kappa$, für den $\log \text{tr}(q_{\kappa,n})$ minimal wird, so dass

$$\beta_\kappa(\Psi_n) = \log \text{tr}(q_{\kappa,n}) .$$

Der Projektor $q_{\kappa,n}$ kann lt. [8] so gewählt werden, dass er auf einen Unterraum $U \subset \mathcal{H}^{(n)}$ projiziert, der von Eigenräumen des Dichteoperators

¹ Aus dem Beweis des Satzes geht hervor, dass $p_n(\delta)$ so gewählt werden kann, dass er in den typischen Unterraum $T_\delta^{\Psi_n}$ von Ψ_n projiziert.

D_{Ψ_n} von Ψ_n aufgespannt wird.² Sei $B^{(n)}$ eine Orthonormalbasis von U aus Eigenvektoren von D_{Ψ_n} , und sei

$$A^{(n)} := \{|b\rangle\langle b| \mid |b\rangle \in B^{(n)}\} .$$

Für jedes $\epsilon > 0$ wird $A^{(n)}$ in drei disjunkte Teilmengen zerlegt:

$$\begin{aligned} A_1^{(n)} &:= \{a \in A^{(n)} \mid \Psi_n(a) > e^{-n(s-\epsilon)}\} , \\ A_2^{(n)} &:= \{a \in A^{(n)} \mid e^{-n(s+\epsilon)} \leq \Psi_n(a) \leq e^{-n(s-\epsilon)}\} , \\ A_3^{(n)} &:= \{a \in A^{(n)} \mid \Psi_n(a) < e^{-n(s+\epsilon)}\} . \end{aligned}$$

Angenommen, es gilt $\limsup_{n \rightarrow \infty} \Psi_n(A_3^{(n)}) > \mu > 0$. Wegen der oberen Schranke der Wahrscheinlichkeit $\Psi_n(a)$ von Elementen $a \in A_3^{(n)}$ erhält man eine untere Schranke für die Anzahl der Elemente aus $A_3^{(n)}$, die für eine μ -Überdeckung benötigt werden, nämlich

$$\min\{\#C \mid C \subset A_3^{(n)}, \Psi_n(C) > \mu\} > \mu e^{n(s+\epsilon)} .$$

Man hat dann

$$\frac{1}{n} \beta_\kappa(\Psi_n) = \frac{1}{n} \log \#A^{(n)} \geq \frac{1}{n} \log \#A_3^{(n)} > \frac{1}{n} \log(\mu e^{n(s+\epsilon)}) = \frac{1}{n} \log \mu + s + \epsilon$$

für unendlich viele $n \in \mathbb{N}$, ein Widerspruch zu Gleichung (4.3).

Also ist $\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n(A_3^{(n)}) = 0$.

Die Menge $A_3^{(n)}$ liefert auch asymptotisch keinen Beitrag zur mittleren Entropie, denn

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n} \sum_{a \in A_3^{(n)}} \Psi_n(a) \log \Psi_n(a) &\leq -\frac{1}{n} \sum_{a \in A_3^{(n)}} \Psi_n(a) \log \left(\frac{1}{\#A_3^{(n)}} \Psi_n(A_3^{(n)}) \right) \\ &= -\frac{1}{n} \sum_{a \in A_3^{(n)}} \left(-\Psi_n(a) \log \#A_3^{(n)} + \Psi_n(a) \log \Psi_n(A_3^{(n)}) \right) \\ &= \Psi_n(A_3^{(n)}) \frac{\log \#A_3^{(n)}}{n} - \frac{1}{n} \Psi_n(A_3^{(n)}) \log \Psi_n(A_3^{(n)}) \longrightarrow 0 \end{aligned}$$

für $n \rightarrow \infty$, da $\frac{\log \#A_3^{(n)}}{n}$ beschränkt ist und $\lim_{x \rightarrow 0} x \log x = 0$. Dabei wurde benutzt, dass $-\sum p_i \log p_i \leq -\sum p_i \log q_i$ für endlichdimensionale Vektoren $(p_i), (q_i)$ mit $\sum_i p_i = \sum_i q_i \leq 1$ und $p_i, q_i \geq 0$.

Da $A_3^{(n)}$ keinen Beitrag zur Entropie liefert, schließt man leicht, dass

² Der Grund dafür ist im Wesentlichen eine Eigenschaft, die auch im Beweis von Satz A.0.3 (im Anhang) benutzt wird, s. dort.

$\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n(A_1^{(n)}) = 0$ gilt, denn andernfalls wäre $\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} S(\Psi_n) < s$, und das ist ein Widerspruch zu

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} S(\Psi_n) = s ,$$

wie Gleichung (3.12) in [8] zu entnehmen ist.

Mit $\kappa := \delta/2$ gibt es eine Zahl $N \in \mathbb{N}$, so dass

$$\Psi_n(A^{(n)}) - \Psi_n(A_2^{(n)}) \leq \frac{\delta}{2}$$

für alle $n \geq N$. Setzt man nun

$$p_n(\delta) := \sum_{a \in A_2^{(n)}} a ,$$

so ist

$$\Psi_n(p_n(\delta)) = \Psi_n(A_2^{(n)}) \geq \Psi_n(A^{(n)}) - \frac{\delta}{2} = \Psi_n(q_{\kappa,n}) - \frac{\delta}{2} \geq 1 - \frac{\delta}{2} - \frac{\delta}{2} = 1 - \delta ,$$

und das ist Punkt 1 der Behauptung. Aus der Definition von $A_2^{(n)}$ folgt sofort³ Punkt 2. Ist außerdem n groß genug, so ist die kleinstmögliche Dimension des Unterraums, in den ein Projektor q mit $\Psi_n(q) \geq 1 - \delta$ projizieren kann, größer als $e^{n(s-\delta)}$ wegen Gleichung (4.3), und damit auch $\text{tr}_n(p_n(\delta)) > e^{n(s-\delta)}$. Genauso ist dann

$$\text{tr}_n(p_n(\delta)) = \#A_2^{(n)} \leq \#A^{(n)} = \text{tr}(q_{\kappa,n}) = e^{\beta\kappa(\Psi_n)} < e^{n(s+\delta)} ,$$

und damit folgt Punkt 3. □

Verwendet man also die kanonische Näherung (4.2), so bleibt die Aussage des Quanten-Shannon-McMillan-Satzes erhalten. Allerdings werden die typischen Projektoren $p_n(\delta)$ für Ψ_n aus Satz 4.1.1 sich von den $p^{(n)}(\delta)$ für $\Psi^{(n)}$ aus Satz 3.2.1 unterscheiden.

Ziel dieser Arbeit ist aber die Charakterisierung der typischen Unterräume von $\Psi^{(n)}$. Es bleibt also zu zeigen, dass die Projektoren $p_n(\delta)$ aus Satz 4.1.1 auch für die Blockzustände $\Psi^{(n)}$ typische Zustände liefern, zumindest asymptotisch für $n \rightarrow \infty$.

Um diese Tatsache zu beweisen, kann ein Lemma aus [12] benutzt werden (siehe dort 3.2.), ein Spezialfall der *Monotonie der relativen Entropie gegenüber Vergrößerung*.

³ Der Beweis dafür, dass die Ungleichung von Punkt 2 dann tatsächlich für *alle* Minimalprojektoren $p \leq p_n(\delta)$ gilt, kann Satz A.0.3 im Anhang entnommen werden.

Lemma 4.1.2 (A Posteriori relative Entropie) ⁴

Sei E_j ($1 \leq j \leq m$) eine Zerlegung der Eins in $\mathcal{B}(\mathcal{H})_+$, d.h. $\sum_j E_j = 1$ mit positiven Observablen E_j . Jede Dichtematrix $D_i \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ bestimmt eine Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$\mu_i = (\mathrm{tr}(D_i E_1), \mathrm{tr}(D_i E_2), \dots, \mathrm{tr}(D_i E_m)) .$$

Für die klassische bzw. quantenmechanische relative Entropie S gilt dann

$$S(\mu_1, \mu_2) \leq S(D_1, D_2) .$$

Der Beweis ist in [12] zu finden; er wird dort aus *Uhlmanns Theorem* der Monotonie der relativen Entropie hergeleitet.

Das folgende Lemma zeigt, wie man aus Abschätzungen für den lokalen Gibbszustand Ψ_n solche für den Blockzustand $\Psi^{(\Lambda_n)}$ gewinnen kann. Es handelt sich dabei um die *Umkehrung* von Lemma 2.3.(iii) in [8]; dort wird genau der entgegengesetzte Übergang beschrieben. Der Beweis verläuft jedoch ganz analog.

Lemma 4.1.3 (Vom kanonischen Zustand zum Blockzustand)

Sei $(\Lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge von Intervallen und $0 \leq a_n \leq \mathbf{1} \in \mathcal{A}_{\Lambda_n}$. Seien $\Psi^{(\Lambda_n)}$ bzw. Ψ_{Λ_n} die Blockzustände bzw. lokalen Gibbszustände zu der Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$. Dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_{\Lambda_n}(a_n) = 1 \quad \Rightarrow \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \Psi^{(\Lambda_n)}(a_n) = 1 .$$

Beweis: Sei

$$F(s, t) := s \log \frac{s}{t} + (1 - s) \log \frac{1 - s}{1 - t} = S((s, 1 - s), (t, 1 - t))$$

für alle $0 < s, t < 1$. Nun ist

$$F\left(\Psi^{(\Lambda_n)}(a_n), \Psi_{\Lambda_n}(a_n)\right) \leq S\left(\Psi^{(\Lambda_n)}, \Psi_{\Lambda_n}\right)$$

nach Lemma 4.1.2 (setze dort $E_1 = a_n$, $E_2 = \mathbf{1} - a_n$). Da Ψ ein Gibbszustand auf \mathcal{A}^∞ ist, erfüllt er nach [8] die *Gibbs-Bedingung im schwachen Sinn*

$$[\Psi^{-\beta W_\Phi(\Lambda_n)}] \upharpoonright \mathcal{A}_{\Lambda_n} = \Psi_{\Lambda_n}$$

für alle endlichen Intervalle Λ_n . Daher gilt

$$S\left(\Psi^{(\Lambda_n)}, \Psi_{\Lambda_n}\right) = S\left(\Psi^{(\Lambda_n)}, [\Psi^{-\beta W_\Phi(\Lambda_n)}] \upharpoonright \mathcal{A}_{\Lambda_n}\right) \leq S\left(\Psi, [\Psi^{-\beta W_\Phi(\Lambda_n)}]\right) ,$$

⁴ Der Name dieses Lemmas wurde aus [12] übernommen und deutet die physikalische Interpretation der μ_i als Wahrscheinlichkeitsverteilungen *nach einer Messung* an.

wobei letztere Ungleichung erneut aus der Monotonie der relativen Entropie folgt, hier für den Fall einer Einschränkung auf ein Teilsystem (A) eines zusammengesetzten Systems (AB)

$$S(\rho^A, \sigma^B) \leq S(\rho^{AB}, \sigma^{AB})$$

wie auf S. 524 in [11] beschrieben. Mit der für die innere Störung eines Zustands allgemeingültigen Formel

$$S(\omega, [\omega^h]) \leq 2\|h\|$$

ergibt sich insgesamt:

$$F\left(\Psi^{(\Lambda_n)}(a_n), \Psi_{\Lambda_n}(a_n)\right) \leq S\left(\Psi, [\Psi^{-\beta W_\Phi(\Lambda_n)}]\right) \leq 2\beta\|W_\Phi(\Lambda_n)\|. \quad (4.4)$$

Die Behauptung des Lemmas folgt aus der Beschränktheit von $\|W_\Phi(\Lambda_n)\|$ (vgl. Satz 3.3.9) und $\lim_{t \rightarrow 1} F(s, t) = \infty$ für jedes $s \in (0, 1)$. \square

Lemma 4.1.4 (Vom kanonischen Zustand zum Blockzustand 2)

Sei $0 \leq a \leq \mathbf{1} \in \mathcal{A}_n$, und seien $\Psi^{(n)}$ bzw. Ψ_n der Blockzustand bzw. der lokale Gibbszustand auf $\mathcal{A}^{(n)}$ zu der Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$. Dann gilt für alle $\delta \in (0, 1)$

$$\Psi_n(a) \geq 1 - \delta \Rightarrow \Psi^{(n)}(a) \geq 1 - \frac{2\beta\|W_\Phi(\Lambda_n)\| + \log 2}{-\log \delta}.$$

Beweis: Es werden sämtliche Bezeichnungen aus Lemma 4.1.3 verwendet. Setzt man in Gleichung (4.4) $a_n := a$ ein und benutzt die Abkürzungen $s := \Psi^{(n)}(a)$ sowie $t := \Psi_n(a)$ und $c := 2\beta\|W_\Phi(\Lambda_n)\|$, so ergibt sich

$$s \log s - s \log t + (1 - s) \log(1 - s) - (1 - s) \log(1 - t) \leq c.$$

Mit $-\log t \geq 0$ und $-\log(1 - t) \geq -\log \delta$ erhält man

$$c \geq (1 - s)(-\log \delta) + s \log s + (1 - s) \log(1 - s).$$

Die letzten beiden Summanden $\mu(s) := s \log s + (1 - s) \log(1 - s)$ ergeben bis auf das Vorzeichen die binäre Entropiefunktion. Es ist $\mu(s) \leq 0$, und die Funktion nimmt ihr globales Minimum $\mu_{\min} = -\log 2$ bei $s_{\min} = \frac{1}{2}$ an. Also gilt

$$c \geq (1 - s)(-\log \delta) - \log 2.$$

Die Behauptung folgt. \square

Satz 4.1.5 (Übereinstimmung der typischen Unterräume)

Seien $\Psi^{(n)}$ bzw. Ψ_n der Blockzustand bzw. der lokale Gibbszustand auf $\mathcal{A}^{(n)}$ zu der Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$. Für alle $\delta \in (0, 1)$ sei

$$\tilde{\delta} := \frac{2\beta E_r(\Phi) + \log 2}{-\log \delta}$$

mit der maximalen Randenergie $E_r(\Phi) := \sup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}} \|W_\Phi(\Lambda)\|$ (es gilt dann $\lim_{\delta \rightarrow 0} \tilde{\delta} = 0$). Ist $p_n(\delta) \in \mathcal{A}^{(n)}$ der Orthogonalprojektor auf den δ -typischen Unterraum $T_\delta^{\Psi_n}$ von Ψ_n , so gibt es ein $N_\delta \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_\delta$ gilt:

1. $\Psi^{(n)}(p_n(\delta)) \geq 1 - \tilde{\delta}$,
2. ist $(|v_i \rangle)_{i=1, \dots, d}$ eine beliebige Orthonormalbasis von $T_\delta^{\Psi_n}$, so gilt für die Entropie der von den Minimalprojektoren $p_i := |v_i \rangle \langle v_i| \leq p_n(\delta)$ erzeugten Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$S \left(\frac{\Psi^{(n)}(p_1)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))}, \dots, \frac{\Psi^{(n)}(p_d)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))} \right) > n(s - \delta - \tilde{\delta} \log D) - f(\tilde{\delta})$$

mit $D = \dim \mathcal{H}^{(1)}$ und

$$f(\tilde{\delta}) := \begin{cases} -\tilde{\delta} \log \tilde{\delta} - \log(1 - \tilde{\delta}) & \text{für } \tilde{\delta} < \frac{1}{e} \\ \frac{1}{e} - \log(1 - \tilde{\delta}) & \text{für } \tilde{\delta} \geq \frac{1}{e} \end{cases} \quad (4.5)$$

3. $e^{n(s-\delta)} < \text{tr}_n(p_n(\delta)) < e^{n(s+\delta)}$.

Beweis: Sei $p_n(\delta) \in \mathcal{A}^{(n)}$ der Orthogonalprojektor auf $T_\delta^{\Psi_n}$. Nach Satz 4.1.1 gibt es ein $N_\delta \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_\delta$

$$\Psi_n(p_n(\delta)) \geq 1 - \delta$$

und außerdem

$$e^{n(s-\delta)} < \text{tr}_n(p_n(\delta)) < e^{n(s+\delta)}.$$

Nach Lemma 4.1.4 gilt dann

$$\Psi^{(n)}(p_n(\delta)) \geq 1 - \tilde{\delta}.$$

Um auch die Gültigkeit von Gleichung (4.5) zu sehen, sei $(|i \rangle)_{i=1, \dots, d_n}$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}^{(n)}$, wobei die ersten d Basisvektoren selbst eine Orthonormalbasis für den Unterraum $T_\delta^{\Psi_n}$ bilden sollen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung μ wird definiert durch

$$\mu = (\mu_1, \dots, \mu_{d_n}) = (\langle 1 | D_{\Psi^{(n)}} | 1 \rangle, \langle 2 | D_{\Psi^{(n)}} | 2 \rangle, \dots, \langle d_n | D_{\Psi^{(n)}} | d_n \rangle).$$

Für die relative Entropie zwischen den Dichtematrizen $D_{\Psi^{(n)}}$ und $\frac{1}{d_n}\mathbf{1}$ erhält man nach Lemma 4.1.2 die Ungleichung

$$S\left(\mu, \frac{1}{d_n}\right) \leq S\left(D_{\Psi^{(n)}}, \frac{1}{d_n}\mathbf{1}\right),$$

wobei $\frac{1}{d_n}$ für die Gleichverteilung steht.

Setzt man die Definition für die relative Entropie ein, so ergibt sich

$$S(\mu) \geq S(D_{\Psi^{(n)}}). \quad (4.6)$$

Da der globale Gibbszustand Ψ ergodisch ist, gilt hier nach [3] die Gleichung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} S(\Psi^{(n)}) = s.$$

Ist n groß genug, so ist also $\frac{1}{n} S(\Psi^{(n)}) > s - \delta$. Gleichung (4.6) liefert

$$\begin{aligned} s - \delta &< \frac{1}{n} S(\Psi^{(n)}) \leq \frac{1}{n} S(\mu) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{d_n} \mu_i \log \mu_i \\ &= -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \mu_i \log \mu_i - \frac{1}{n} \sum_{i=d+1}^{d_n} \mu_i \log \mu_i. \end{aligned}$$

Ist $(p_i)_{i=1, \dots, d}$ gegeben mit $p_i \geq 0$ und $\sum_i p_i = \mu \leq 1$, so gilt allgemein⁵ die Abschätzung $-\sum_i p_i \log p_i \leq \mu \log d - \mu \log \mu$. Wegen

$$\sum_{i=d+1}^{d_n} \mu_i = 1 - \Psi^{(n)}(p_n(\delta)) \leq \tilde{\delta}$$

ergibt sich für $\tilde{\delta} < \frac{1}{e}$ (andernfalls kann $-\mu \log \mu \leq \frac{1}{e}$ abgeschätzt werden) die Ungleichung

$$s - \delta < -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^d \mu_i \log \mu_i + \frac{1}{n} \tilde{\delta} \log(d_n - d) - \frac{1}{n} \tilde{\delta} \log \tilde{\delta}. \quad (4.7)$$

Für die gesuchte Entropie in Gleichung (4.5) erhält man dann wegen $\Psi^{(n)}(p_i) = \mu_i$ und $\sum_{i=1}^d \mu_i = \Psi^{(n)}(p_n(\delta)) < 1$

$$\begin{aligned} S &:= S\left(\frac{\Psi^{(n)}(p_1)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))}, \frac{\Psi^{(n)}(p_2)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))}, \dots, \frac{\Psi^{(n)}(p_d)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))}\right) \\ &= -\sum_{i=1}^d \frac{\Psi^{(n)}(p_i)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))} \log \frac{\Psi^{(n)}(p_i)}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))} \\ &= -\frac{\sum_{i=1}^d \mu_i \log \mu_i}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))} + \frac{\sum_{i=1}^d \mu_i \log \Psi^{(n)}(p_n(\delta))}{\Psi^{(n)}(p_n(\delta))} \\ &\geq -\sum_{i=1}^d \mu_i \log \mu_i + \log \Psi^{(n)}(p_n(\delta)) \geq -\sum_{i=1}^d \mu_i \log \mu_i + \log(1 - \tilde{\delta}). \end{aligned}$$

⁵ Siehe Satz A.0.2 im Anhang.

Mit Gleichung (4.7) und $d_n \leq D^n$ ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} S &> n \left(s - \delta - \frac{1}{n} \tilde{\delta} \log(d_n - d) + \frac{1}{n} \tilde{\delta} \log \tilde{\delta} \right) + \log(1 - \tilde{\delta}) \\ &> ns - n\delta - n\tilde{\delta} \log D + \tilde{\delta} \log \tilde{\delta} + \log(1 - \tilde{\delta}) . \end{aligned} \quad \square$$

Wie dieser Satz zeigt, ist die kanonische Näherung auf langen Blöcken gerechtfertigt: Die typischen Unterräume $T_\delta^{\Psi_n}$ sind auch für die Blockzustände $\Psi^{(n)}$ in dem Sinn "typisch", dass

- asymptotisch das volle Gewicht des Zustandes $\Psi^{(n)}$ auf den Unterräumen $T_\delta^{\Psi_n}$ liegt,
- diese Unterräume etwa die Dimension e^{ns} besitzen, und
- die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\Psi^{(n)}(p)$ einzelner Elemente (Minimalprojektoren in Unterräumen von $T_\delta^{\Psi_n}$) beliebig nahe an der Gleichverteilung liegt.

Bekanntermaßen wird die Entropie gerade für die Gleichverteilung maximal. In einem Raum der Dimension e^{ns} ist diese maximale Entropie dann gleich ns . Nach Gleichung (4.5) weicht die Entropie der Verteilung im typischen Unterraum bezüglich $\Psi^{(n)}$ nur sehr wenig von ns ab.

4.2 Ergebnis: Äquivalenz der Gesamtheiten

Nachdem sich im letzten Abschnitt die kanonische Näherung auf langen Blöcken als gerechtfertigt erwiesen hat, ist es nun möglich, die typischen Unterräume bei Heisenbergketten explizit zu berechnen: Es handelt sich um Eigenzustände des Hamilton-Operators, deren Energie nicht weit von der inneren Energiedichte u abweicht.

Satz 4.2.1 (Charakterisierung der typischen Unterräume)

Seien $\Psi \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^\infty)$ bzw. $\Psi_n \in \mathcal{S}(\mathcal{A}^{(n)})$ der globale bzw. lokale Gibbszustand zu der Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ mit innerer Energiedichte u . Dann existiert eine Folge $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u$, so dass der δ -typische Unterraum $T_\delta^{\Psi_n}$ von Ψ_n gegeben ist durch

$$T_\delta^{\Psi_n} = \text{span} \left\{ U \text{ Eigenraum von } H_n \mid \frac{1}{n} E_U \in \left(u_n - \frac{\delta}{\beta}, u_n + \frac{\delta}{\beta} \right) \right\} ,$$

wobei E_U für den zu U gehörigen Eigenwert steht.

Beweis: Jeder Eigenvektor zu D_{Ψ_n} mit Eigenwert λ ist wegen $D_{\Psi_n} = \frac{e^{-\beta H_n}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})}$ auch Eigenvektor zu H_n mit Eigenwert E , wobei $\lambda = \frac{e^{-\beta E}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})}$

gilt. Der Eigenvektor liegt also genau dann in T_δ^Ψ , wenn

$$\frac{e^{-\beta E}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})} \in \left(e^{-n(s+\delta)}, e^{-n(s-\delta)} \right).$$

Dies ist äquivalent zu

$$\beta E + \log \text{tr}(e^{-\beta H_n}) \in (n(s-\delta), n(s+\delta))$$

oder auch

$$\frac{\beta}{n} E \in \left(s - \frac{1}{n} \log \text{tr}(e^{-\beta H_n}) - \delta, s - \frac{1}{n} \log \text{tr}(e^{-\beta H_n}) + \delta \right).$$

Setzt man nun

$$u_n := \frac{1}{\beta} \left(s - \frac{1}{n} \log \text{tr}(e^{-\beta H_n}) \right)$$

und beachtet, dass nach Satz 3.3.1

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \text{tr}(e^{-\beta H_n}) = p(\beta)$$

gilt (der Logarithmus der Zustandssumme konvergiert also gegen die "pressure", was bis auf einen Vorfaktor gleich der freien Energiedichte ist), dann folgt auch $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u$ aus der Gleichung $s = \beta u + p(\beta)$ für die thermodynamische Stabilität des Gibbszustandes, siehe Definition 3.3.6. \square

Satz 4.2.1 besitzt eine interessante physikalische Interpretation: er zeigt für die Heisenbergsche Spinkette (mit endlichreichweitiger Wechselwirkung⁶) eine Eigenschaft, die in der Literatur als *Äquivalenz der Gesamtheiten*⁷ bezeichnet wird.

Für die Spinkette mit der inneren Energiedichte $u = \frac{1}{n} \langle H_n \rangle$ gibt es (mindestens) zwei verschiedene Möglichkeiten der thermodynamischen Beschreibung: Einerseits die *mikrokanonische Gesamtheit*, bei der man sich die Kette auf einer festen Energiefläche $E = E_0 = n \cdot u$ im Zustandsraum lokalisiert denkt (oder zumindest in einer flachen Energieschale $E \in (E_0 - \delta, E_0 + \delta)$) und alle dann zugänglichen Mikrozustände als gleich wahrscheinlich betrachtet; andererseits die *kanonische Gesamtheit* mit dem Gibbszustand (wie in dieser Arbeit), bei der Zustände mit beliebigen Energien zugelassen sind, wobei die Dichte im Zustandsraum aber mit $e^{-\beta E}$ variiert.

Wie Satz 4.2.1 und Satz 4.1.1 zeigen, folgt aus dem Quanten-Shannon-McMillan-Satz die Gleichwertigkeit der beiden Beschreibungen für die Heisenbergsche Spinkette: im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ wird die Energie des kanonischen Zustandes mit an Sicherheit grenzender Wahrscheinlichkeit in einer beliebig dünnen Energieschale um die innere Energiedichte u

⁶ (genauer gesagt mit einer Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$)

⁷ (engl. "equivalence of ensembles")

lokalisiert sein (Punkt 1 von Satz 4.1.1), und die Verteilung der Zustände innerhalb dieser Energieschale wird beliebig nahe an der Gleichverteilung liegen (Punkt 2 dieses Satzes). Das entspricht genau der mikrokanonischen Beschreibung.

4.3 Visualisierung der AEP beim Heisenberg-Modell

Ziel dieses Abschnitts ist es, eine Aussage des Quanten-Shannon-McMillan-Satzes, nämlich die sogenannte "AEP" (für "asymptotic equipartition property"), die asymptotische Gleichverteilung der Wahrscheinlichkeiten auf dem typischen Unterraum, an einem konkreten Beispiel numerisch zu berechnen und graphisch darzustellen.

Der Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2} J \sum_{i=1}^{n-1} (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} - \mathbf{1})$$

beschreibt für $J = -1$ das Heisenbergmodell einer ferromagnetischen Spinkette von n Spins mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung.⁸ Mit einem Mathematica-Programm (siehe "Notebook 2" im Anhang B) wurden für verschiedene n die Eigenwerte λ des zugehörigen Gibbszustandes der inversen Temperatur $\beta = 1$ berechnet und der Größe nach geordnet. Anschließend wurde $-\frac{1}{n} \log \lambda$ geplottet.

Die Aussage der AEP, d.h. von Punkt 2 in Satz 4.1.1, ist dann die, dass für großes n fast alle Werte von $-\frac{1}{n} \log \lambda$ in einem beliebig kleinen Intervall um die Entropiedichte s liegen. In der graphischen Darstellung sollten die Plots für große n also immer mehr wie eine waagerechte Linie mit dem konstanten Funktionswert s aussehen (mit kleinen "Ausreißern" an beiden Enden).

Das Mathematica-Programm berechnet und diagonalisiert den Gibbszustand direkt, ohne weitere Annahmen und Optimierungen. Das hat den Nachteil, dass der Rechenaufwand sich für jeden weiteren Spin (d.h. für den Übergang n zu $n + 1$) ungefähr vervierfacht. Ab etwa $n = 12$ überschreitet der Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf jedes sinnvolles Maß. Damit kommt man dem thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ leider nicht sehr nahe.

Der Vorteil ist aber, dass man ohne weitere Annahmen direkt und unkompliziert einen Eindruck vom Verhalten des Systems gewinnen kann. Tatsächlich erkennt man in der Entwicklung von $n = 2$ bis $n = 10$ bereits in der linken Hälfte einen leichten Wechsel von der konvexen zu einer konkaven Form der Kurve, wie man es bei Annäherung an eine horizontale Gerade erwarten würde.

⁸ Dieses Modell wird z.B. in [7] ausführlich diskutiert.

KAPITEL 4. ANWENDUNG AUF DIE HEISENBERGSCHE
SPINKETTE

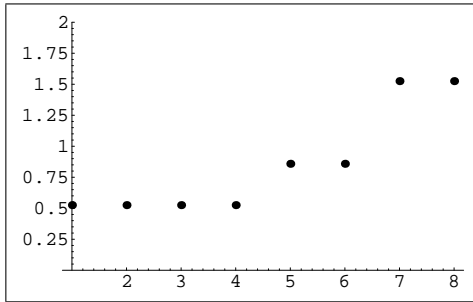


Abbildung 4.1: $n=3$

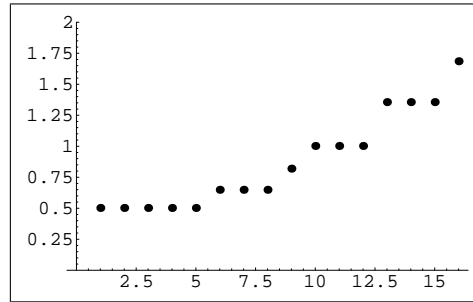


Abbildung 4.2: $n=4$

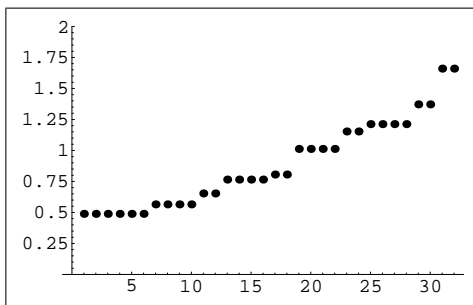


Abbildung 4.3: $n=5$

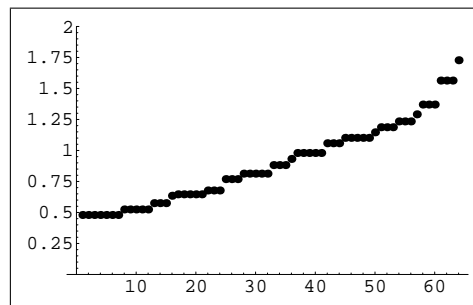


Abbildung 4.4: $n=6$

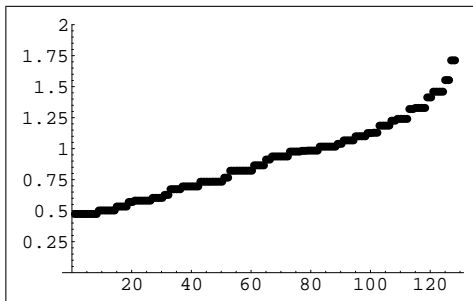


Abbildung 4.5: $n=7$

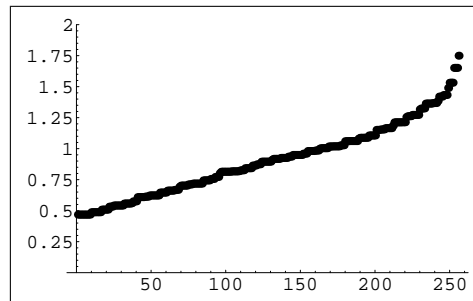


Abbildung 4.6: $n=8$

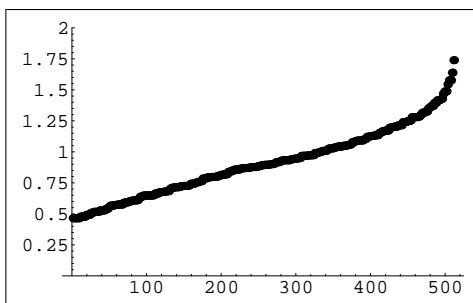


Abbildung 4.7: $n=9$

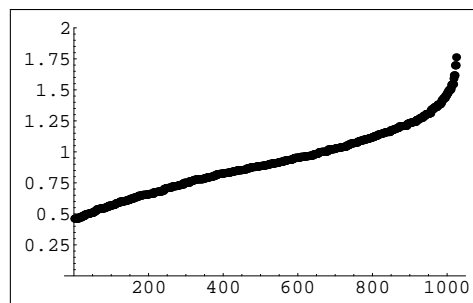


Abbildung 4.8: $n=10$

Kapitel 5

Spinketten-Modelle mit Leiteroperatorenstruktur

Wie im letzten Kapitel gezeigt wurde, besteht die Menge der δ -typischen Zustände bei Spinketten mit endlichreichweitiger Wechselwirkung asymptotisch genau aus den Zuständen, deren Energiedichte in einer (δ/β) -Umgebung der inneren Energiedichte u liegt.

Eine explizite physikalische Beschreibung dieser Zustände ist deshalb äquivalent zu der Charakterisierung von Energiezuständen der Kette. Dass es sich dabei aber wohl um ein sehr schwieriges Problem handelt, erkennt man an den typischen Resultaten in der Literatur. In [10] wurde beispielsweise bewiesen, dass für ferromagnetische Heisenberg-Ketten mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung der Form

$$H = - \sum_{x=1}^{L-1} J_{x,x+1} \left[\frac{1}{s_x s_{x+1}} S_{x,s_x} S_{x+1,s_{x+1}} - 1 \right], \quad (5.1)$$

wobei $s_x \in \{\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots\}$ den jeweiligen Spin auf Platz x bezeichnet und $J_{x,x+1} > 0$ beliebige Kopplungskonstanten sind, eine *strikte ferromagnetische Ordnung der Energiestufen* herrscht. Das bedeutet: Ist $E(H, S)$ der *kleinste* Energieeigenwert von H für den Gesamtspin S , so gilt $E(H, S) > E(H, S')$, falls $S < S'$ ist. Die minimalen Energien in Unterräumen mit festgelegtem Gesamtspin S sind also monoton fallend in S .

Solche Resultate zeigen, wie schwierig es sein dürfte, eine explizite Charakterisierung der Zustände im allgemeinen Fall einer beliebigen Wechselwirkung $\Phi \in \mathfrak{B}_1^{(r)}$ zu erhalten. Für die typischen Unterräume des Modells (5.1) folgt aus dem obigen Ergebnis beispielsweise nur die Existenz einer Obergrenze des Gesamtspins S . Damit sind für den allgemeinen Fall aber allenfalls noch schwächere Aussagen über die Eigenschaften der typischen Zustände zu erwarten.

Es bietet sich also an, sich auf ein spezielles, einfaches Modell zu beschränken, in der Hoffnung, interessante Ergebnisse zu erhalten, die sich

evtl. auf den allgemeinen Fall übertragen lassen. Als ein solches Modell hat sich die *XY-Kette* erwiesen, die im nächsten Abschnitt vorgestellt wird. Sie dient als Prototyp für eine Klasse von¹ Modellen, die einen Formalismus von *Leiteroperatoren* zur Diagonalisierung des Hamilton-Operators ermöglichen.

5.1 Das XY-Modell

Gegeben ist eine eindimensionale Spinkette der Länge n mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung der Form

$$H_n = - \sum_{i=1}^{n-1} (\sigma_{i,x} \sigma_{i+1,x} + \sigma_{i,y} \sigma_{i+1,y}) . \quad (5.2)$$

Das Ziel ist es, den Hamilton-Operator zu diagonalisieren, um Energie-Eigenzustände zu berechnen. Die nun folgende Darstellung entstammt vollständig dem Buch von Barry Simon ([16]); der einzige Unterschied ist der, dass hier *offene* Randbedingungen betrachtet werden (d.h. es wird der lokale Hamilton-Operator (5.2) *ohne* Randbedingungen verwendet), während bei Barry Simon mit *quasiperiodischen Randbedingungen*² gerechnet wird. Nach den Ergebnissen in Abschnitt 3.3 sind im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ beide Herangehensweisen äquivalent.

Mit der Definition für Spin-Leiteroperatoren

$$\sigma_j^\pm := \frac{1}{2} (\sigma_{j,x} \pm i \sigma_{j,y})$$

kann man den Hamilton-Operator zunächst umschreiben als

$$H_n = -2 \sum_{i=1}^{n-1} (\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+) .$$

Daraus werden nun Operatoren A_j definiert durch die sog. *Jordan-Wigner-Transformation*

$$A_j = \left[\exp \left(i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_k^+ \sigma_k^- \right) \right] \sigma_j^- = \alpha_1 \dots \alpha_{j-1} \sigma_j^- , \quad (5.3)$$

¹ Zu den Modellen, die auf ähnliche Art und Weise durch Leiteroperatoren gelöst werden können, zählt z.B. auch ein allgemeineres XY-Modell mit dem Hamilton-Operator

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^M (\sigma_m^+ \sigma_{m+1}^- + \sigma_m^- \sigma_{m+1}^+) - \frac{1}{2} \gamma \sum_{m=1}^M (\sigma_m^+ \sigma_{m+1}^+ + \sigma_m^- \sigma_{m+1}^-) - h \sum_{m=1}^M \sigma_m^z ,$$

wie es in [9] beschrieben wird.

² *Quasiperiodisch* bedeutet dabei, dass ein Hamilton-Operator wie in Gleichung (5.5) mit der Transfermatrix $M_{ij}^{(n)} = -2$ für $i \equiv j \pmod{n}$ verwendet wird, was die Rechnung vereinfacht. Dies entspricht *nicht* dem Operator $\tilde{H}_n = - \sum_{i=1}^n (\sigma_{i,x} \sigma_{i+1,x} + \sigma_{i,y} \sigma_{i+1,y})$ mit periodischer Randbedingung $\sigma_{n+1} \equiv \sigma_1$.

mit $\alpha_l = \exp(i\pi\sigma_l^+\sigma_l^-) = \mathbf{1} - 2\sigma_l^+\sigma_l^-$. Diese Operatoren heißen *Fermion-Operatoren*, da sie den Antivertauschungsrelationen

$$\{A_j, A_k\} = 0 \quad , \quad \{A_j^*, A_k\} = \delta_{jk}\mathbf{1} \quad (5.4)$$

genügen. Eine kurze Rechnung zeigt, dass man dann den Hamilton-Operator schreiben kann als

$$H_n = \sum_{i,j=1}^n M_{ij}^{(n)} A_i^* A_j \quad . \quad (5.5)$$

Die Transfermatrix $M^{(n)}$ ist dabei gegeben durch

$$M_{ij}^{(n)} = \begin{cases} -2 & \text{für } i - j = \pm 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Beispielsweise lautet die Transfermatrix für $n = 7$

$$M^{(7)} = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

Anstatt der $2^n \times 2^n$ -Matrix H_n genügt es, die $n \times n$ -Matrix $M^{(n)}$ zu diagonalisieren. Dies liefert die unitäre Transformationsmatrix³

$$U_{jk}^{(n)} = \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jk\pi}{n+1}}{\sqrt{n+1}} \quad , \quad (5.6)$$

und es ergibt sich

$$U^{(n)} M^{(n)} U^{(n)*} = \text{diag}(\lambda_j)_{j=1,\dots,n} = \text{diag} \left(-4 \cos \frac{j\pi}{n+1} \right)_{j=1,\dots,n} \quad . \quad (5.7)$$

Definiert man noch die *Vernichtungsoperatoren*

$$B_i := \sum_{j=1}^n U_{ij}^{(n)} A_j \quad , \quad (5.8)$$

bei denen es sich ebenfalls um Fermionoperatoren handelt (d.h. sie genügen ebenfalls den Antivertauschungsrelationen (5.4)), und den *Vakuumzustand*

$$|\eta\rangle := |\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle = |\downarrow\rangle^{\otimes n} \quad ,$$

so folgt aus Gleichung (5.5) folgende Diagonalisierung von H_n :

³ Der Beweis für diese Darstellung ist im Anhang als Satz A.0.4 zu finden.

Satz 5.1.1 (Diagonalisierung von H_n beim XY-Modell)

Für jede Teilmenge $T \subset \{1, \dots, n\}$ sei der Vektor $|T\rangle$ definiert durch

$$|T\rangle := \prod_{j \in T} B_j^* |\eta\rangle,$$

wobei die Faktoren in aufsteigender Reihenfolge multipliziert werden. Dann bilden die Vektoren $(|T\rangle)_{T \subset \{1, \dots, n\}}$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}^{(n)}$ aus Eigenvektoren von H_n . Zu jedem Eigenvektor $|T\rangle$ gehört der Eigenwert

$$E_T = \sum_{j \in T} \lambda_j,$$

wobei λ_j für den j -ten Eigenwert der Transfermatrix $M^{(n)}$ steht, wie in Gleichung (5.7) angegeben.

Der **Beweis** ist ausführlich im Buch von Barry Simon [16] dargestellt.

5.2 Intervalle zur Konstruktion typ. Zustände der XY-Kette

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ eine Charakterisierung der typischen Zustände der XY-Kette mit Hilfe von *Intervallen* möglich ist. Zunächst stellt man fest, dass nach Gleichung (5.7) die Eigenwerte λ_j der Transfermatrix für alle $n \in \mathbb{N}$ geschrieben werden können als

$$\lambda_j = \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right),$$

wenn die *Eigenwertdichtefunktion* $\lambda : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\lambda(x) := -4 \cos(\pi x)$$

definiert wird. Nach Satz 4.2.1 ist ein Energie-Eigenraum U genau dann δ -typisch, wenn für den dazugehörigen Eigenwert E_U gilt:

$$\frac{1}{n} E_U \in \left(u_n - \frac{\delta}{\beta}, u_n + \frac{\delta}{\beta}\right).$$

Für das XY-Modell ist dies nach Satz 5.1.1 äquivalent zu

$$E_T = \frac{1}{n} \sum_{j \in T} \lambda_j = \frac{1}{n} \sum_{j \in T} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) \in \left(u_n - \frac{\delta}{\beta}, u_n + \frac{\delta}{\beta}\right).$$

Die Idee ist naheliegend, im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ die Summe $\frac{1}{n} \sum_{j \in T} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right)$ in geeigneter Weise durch ein Riemann-Integral zu approximieren. Dies kann folgendermaßen geschehen:

Satz 5.2.1 (Intervalle zur Konstruktion typischer Zustände)

Sei Ψ_n der lokale Gibbszustand der XY-Kette der Länge n , sei $\tilde{T} \subset (0, 1)$ eine Vereinigung endlich vieler Intervalle, und mit

$$T_n := \lfloor (n+1) \cdot \tilde{T} \rfloor = \{ \lfloor (n+1) \cdot x \rfloor \mid x \in \tilde{T} \} \subset \{1, \dots, n\}$$

sei $|T_n \rangle \in \mathcal{H}^{(n)}$ der durch \tilde{T} erzeugte⁴ Energie-Eigenzustand auf $\mathcal{A}^{(n)}$. Gilt dann für die innere Energiedichte u der Kette

$$\left| u - \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx \right| < \frac{\delta}{\beta}, \quad (5.9)$$

so gibt es ein $N \in \mathbb{N}$, so dass $|T_n \rangle$ für alle $n \geq N$ δ -typisch ist, d.h.

$$|T_n \rangle \in T_\delta^{\Psi_n}.$$

Beweis: Sei $\epsilon := \frac{\delta}{\beta} - |u - \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx| > 0$. Da $\lambda(x)$ stetig ist, gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j \in T_n} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) = \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx.$$

Also gibt es ein $N_1 \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_1$

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{j \in T_n} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) - \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx \right| < \frac{\epsilon}{2}.$$

Sei $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ die zu Ψ_n gehörige Folge mit $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u$ aus Satz 4.2.1. Dann gibt es ein $N_2 \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_2$

$$|u_n - u| < \frac{\epsilon}{2}.$$

Für alle $n \geq N := \max\{N_1, N_2\}$ gilt dann

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{n} E_{T_n} - u_n \right| &= \left| \frac{1}{n} \sum_{j \in T_n} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) - u_n \right| \\ &\leq \left| \frac{1}{n} \sum_{j \in T_n} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) - u \right| + |u - u_n| \\ &\leq \left| \frac{1}{n} \sum_{j \in T_n} \lambda\left(\frac{j}{n+1}\right) - \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx \right| + \left| \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx - u \right| + |u - u_n| \\ &< \left| u - \int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx \right| + \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} = \frac{\delta}{\beta}. \end{aligned}$$

Der Eigenraum zu $|T_n \rangle$ erfüllt also die Bedingung von Satz 4.2.1. \square

⁴ Spricht man von einem Vektor $|v \rangle \in \mathcal{H}^{(n)}$ als *Zustand*, so ist eigentlich der durch $|v \rangle$ erzeugte Zustand $\phi_{|v \rangle}$ auf $\mathcal{A}^{(n)}$ gemeint, für alle $a \in \mathcal{A}^{(n)}$ gegeben durch

$$\phi_{|v \rangle}(a) = \langle v | a | v \rangle = \text{tr}(a | v \rangle \langle v |).$$

Jede Vereinigung von Intervallen, über der das Integral der Eigenwertdichtefunktion $\lambda(x)$ in etwa die innere Energiedichte u ergibt, generiert also für große n typische Zustände der Spinkette.

5.3 Eine Vermutung über typ. Zustände auf langen Blöcken

Nach den Ergebnissen des letzten Abschnitts (Satz 5.2.1) ist bekannt, dass Vereinigungen von Intervallen $\tilde{T} \subset [0, 1]$, die Bedingung (5.9) erfüllen, für große n δ -typische Zustände $|T_n \rangle \in T_{\tilde{T}}^{\Psi_n}$ generieren. Die Frage ist nun, wie sich diese Zustände $|T_n \rangle$ für festes \tilde{T} , aber verschiedene n zueinander verhalten. Dazu sei folgende Vermutung formuliert:

Vermutung: Sei $\tilde{T} \subset [0, 1]$ eine Vereinigung endlich vieler Intervalle, und sei $|T_n \rangle \in \mathcal{H}^{(n)}$ der durch \tilde{T} erzeugte Energie-Eigenzustand auf $\mathcal{A}^{(n)}$, wie in Satz 5.2.1 definiert. Dann konvergiert $|T_n \rangle$ für $n \rightarrow \infty$ gegen einen Zustand auf \mathcal{A}^∞ , d.h. für alle $a \in \mathcal{A}_\infty$ existiert der Grenzwert

$$\phi_{\tilde{T}}(a) := \lim_{n \rightarrow \infty} \phi_{T_n}(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle T_n | a | T_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{tr}(a | T_n \rangle \langle T_n |) .$$

Ein Beweis dieser Vermutung steht leider noch aus. Die Konstruktion der Zustände $|T_n \rangle$ erfordert mit steigendem n , dass auf eine komplizierte Weise gleichzeitig die Anzahl der Spins *und* die Anzahl der Erzeugungsoperatoren vergrößert wird, und daran ist bisher jeder Beweisversuch gescheitert. Folgender Satz gibt aber einen Hinweis, dass die Zustände tatsächlich konvergieren *könnten*:

Satz 5.3.1 (Asymptotische Entwicklung der Leiteroperatoren)

Auf der XY-Kette der Länge $s+n$ gilt für alle $a \in \mathcal{A}^{(s)}$ und $j \in \{1, \dots, s+n\}$

$$\begin{aligned} \langle \{j\} | a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} | \{j\} \rangle &= \left[1 - \frac{\left(\frac{1}{2} + s - \frac{\sin(\tilde{j}\pi(2s+1))}{2 \sin(\tilde{j}\pi)} \right)}{s+n+1} \right] \langle \eta^{(s)} | a | \eta^{(s)} \rangle \\ &+ \frac{2}{s+n+1} \sum_{k,l=1}^s \sin(\tilde{j}k\pi) \sin(\tilde{j}l\pi) \langle \eta^{(s)} | \sigma_k^- a \sigma_l^+ | \eta^{(s)} \rangle , \end{aligned}$$

wobei $|\{j\} \rangle = B_j^* | \eta \rangle$ ein in Satz 5.1.1 definierter Energie-Eigenzustand ist. Dabei ist $\tilde{j} = \frac{j}{s+n+1}$, und $|\eta^{(s)} \rangle = | \downarrow \rangle^{\otimes s}$ ist der Vakuumzustand auf $\mathcal{A}^{(s)}$. Anders ausgedrückt,

$$\begin{aligned}
D_{\phi_{|\{j\}\rangle}} \upharpoonright \mathcal{A}^{(s)} &= |\{j\}\rangle \langle \{j\}| \upharpoonright \mathcal{A}^{(s)} \\
&= \left(1 - \frac{\frac{1}{2} + s - \frac{\sin(\tilde{j}\pi(2s+1))}{2\sin(\tilde{j}\pi)}}{s+n+1} \right) |\eta^{(s)}\rangle \langle \eta^{(s)}| \\
&\quad + \frac{2}{s+n+1} \sum_{k,l=1}^s \sin(\tilde{j}k\pi) \sin(\tilde{j}l\pi) \sigma_l^+ |\eta^{(s)}\rangle \langle \eta^{(s)}| \sigma_k^-.
\end{aligned}$$

Beweis: Zunächst stellt man fest, dass für alle k

$$\alpha_k |\eta\rangle = (\mathbf{1} - 2\sigma_k^+ \sigma_k^-) |\eta\rangle = |\eta\rangle$$

gilt. Setzt man Gleichungen (5.8) und (5.3) ein, so erhält man

$$\begin{aligned}
\phi_{|\{j\}\rangle}(a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n}) &= \langle \{j\}| a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} |\{j\rangle \rangle \tag{5.10} \\
&= \langle \eta^{(s+n)} | \sum_{k=1}^{s+n} A_k U_{jk}^{(s+n)} a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \sum_{l=1}^{s+n} U_{lj}^{(s+n)*} A_l^* | \eta^{(s+n)} \rangle \\
&= \langle \eta^{(s+n)} | \sum_{k,l=1}^{s+n} U_{jk}^{(s+n)} U_{lj}^{(s+n)*} \alpha_1 \dots \alpha_{k-1} \sigma_k^- a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \\
&\quad \sigma_l^+ \alpha_{l-1} \dots \alpha_1 | \eta^{(s+n)} \rangle \\
&= \sum_{k,l=1}^s U_{jk}^{(s+n)} U_{lj}^{(s+n)*} \langle \eta^{(s)} | \sigma_k^- a \sigma_l^+ | \eta^{(s)} \rangle \\
&\quad + \sum_{k=1}^s \sum_{l=s+1}^{s+n} U_{jk}^{(s+n)} U_{lj}^{(s+n)*} \langle \eta^{(s+n)} | \sigma_k^- a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \sigma_l^+ | \eta^{(s+n)} \rangle \\
&\quad + \sum_{k=s+1}^{s+n} \sum_{l=1}^s U_{jk}^{(s+n)} U_{lj}^{(s+n)*} \langle \eta^{(s+n)} | \sigma_k^- a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \sigma_l^+ | \eta^{(s+n)} \rangle \\
&\quad + \sum_{k,l=s+1}^{s+n} U_{jk}^{(s+n)} U_{lj}^{(s+n)*} \langle \eta^{(s+n)} | \sigma_k^- a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \sigma_l^+ | \eta^{(s+n)} \rangle .
\end{aligned}$$

Der zweite Summand nach dem letzten Gleichheitszeichen muss wegfallen, da für alle $k \in \{1, \dots, s\}$ und $l \in \{s+1, \dots, s+n\}$ gilt

$$\begin{aligned}
&\langle \eta^{(s+n)} | \sigma_k^- a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} \sigma_l^+ | \eta^{(s+n)} \rangle \\
&= \left(\langle \eta^{(s)} | \sigma_k^- \right) \otimes \langle \eta^{(s+1, s+n)} | a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n} | \eta^{(s)} \rangle \otimes \left(\sigma_l^+ | \eta^{(s+1, s+n)} \rangle \right) \\
&= \langle \eta^{(s)} | \sigma_k^- a | \eta^{(s)} \rangle \cdot \langle \eta^{(s+1, s+n)} | \sigma_l^+ | \eta^{(s+1, s+n)} \rangle .
\end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $|\eta^{(s+1, s+n)}\rangle$ den Vakuumzustand auf $\mathcal{A}_{[s+1, s+n]}$. Da die Vektoren $|\eta^{(s+1, s+n)}\rangle$ (alle Spins nach unten) und $\sigma_l^+ |\eta^{(s+1, s+n)}\rangle$ (ein Spin

nach oben) orthogonal zueinander sind, ist dieser Ausdruck gleich Null. Aus dem gleichen Grund verschwindet der dritte Summand nach dem letzten Gleichheitszeichen in (5.10), und es bleibt übrig

$$\begin{aligned} \phi_{|\{j\}\rangle}(a \otimes \mathbf{1}^{\otimes n}) &= \sum_{k,l=1}^s \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jk\pi}{s+n+1}}{\sqrt{s+n+1}} \cdot \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jl\pi}{s+n+1}}{\sqrt{s+n+1}} \langle \eta^{(s)} | \sigma_k^- a \sigma_l^+ | \eta^{(s)} \rangle \\ &+ \langle \eta^{(s)} | a | \eta^{(s)} \rangle \sum_{k,l=s+1}^{s+n} \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jk\pi}{s+n+1}}{\sqrt{s+n+1}} \cdot \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jl\pi}{s+n+1}}{\sqrt{s+n+1}} \\ &\quad \langle \eta^{(s+1,s+n)} | \sigma_k^- \sigma_l^+ | \eta^{(s+1,s+n)} \rangle . \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt mit $\langle \eta^{(s+1,s+n)} | \sigma_k^- \sigma_l^+ | \eta^{(s+1,s+n)} \rangle = \delta_{kl}$ und $\phi_{|\{j\}\rangle}(\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}^{\otimes n}) = 1$, wenn man

$$\sum_{k=1}^s \sin^2(\tilde{j}k\pi) = \frac{1}{4} + \frac{s}{2} - \frac{\sin(\tilde{j}\pi(2s+1))}{4\sin(\tilde{j}\pi)}$$

benutzt. □

Warum ist das nun ein Indiz für die Vermutung, dass der durch \tilde{T} erzeugte Energie-Eigenzustand $|T_n\rangle$ für $n \rightarrow \infty$ konvergiert? Die Aussage von Satz 5.3.1 kann auch in der Form

$$\begin{aligned} D_{\phi_{|\{j\}\rangle}} \upharpoonright \mathcal{A}^{(s)} &= \left(1 - \frac{\frac{1}{2} + s - \frac{\sin(\tilde{j}\pi(2s+1))}{2\sin(\tilde{j}\pi)}}{n} \right) |\eta^{(s)}\rangle \langle \eta^{(s)}| \\ &+ \frac{2}{n} \sum_{k,l=1}^s \sin(\tilde{j}k\pi) \sin(\tilde{j}l\pi) \sigma_l^+ |\eta^{(s)}\rangle \langle \eta^{(s)}| \sigma_k^- \\ &+ \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \end{aligned} \quad (5.11)$$

geschrieben werden (daher auch der Name "asymptotische Entwicklung der Leiteroperatoren"). Zunächst ist es bemerkenswert, dass nicht j selbst, sondern nur die Größe

$$\tilde{j} = \frac{j}{s+n+1}$$

im Ergebnis (5.11) auftritt; das ist aber gerade der der natürlichen Zahl j bei einer Kette der Länge $s+n$ zugeordnete x -Wert im Intervall $(0,1)$, und diese x -Werte (Elemente aus \tilde{T}) werden ja bei der Konstruktion von Satz 5.2.1 gerade konstant gehalten (im Gegensatz zu $j \in T_n$, das dann linear in n steigt).

Weiterhin sei daran erinnert, dass der Zustand $|\{j\}\rangle$ durch Anwendung des Erzeugungsoperators B_j^* auf den Vakuumzustand $|\eta\rangle$ entsteht

$$|\{j\}\rangle = B_j^* |\eta\rangle .$$

Gleichung (5.11) sagt dann aus, dass sich der Zustand lokal (auf $\mathcal{A}^{(s)}$) in nullter Näherung nicht ändert, sondern der Vakuumzustand bleibt. In erster Näherung kommen noch *Spinwellen* hinzu, sinusförmige Anteile mit jeweils einem einzigen Spin nach oben.

In der Konstruktion von Satz 5.2.1 wird nun nicht nur ein Erzeuger B_j^* auf den Vakuumzustand angewendet, sondern es werden mehrere davon aneinandergereiht, genauer gesagt $\mathcal{O}(n)$ viele. In Analogie zu Ausdrücken wie

$$\left(1 + \frac{c}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)\right)^{x \cdot n} \rightarrow e^{cx} \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

würde man erwarten, dass im Fall einer Konvergenz gegen einen bestimmten Zustand ein einzelner Erzeuger auf einen lokalen Zustand wirkt wie

$$\phi_{B_j^*|v\rangle} \approx \left(\mathbf{1} + \frac{1}{n}\hat{C} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \phi_{|v\rangle} ,$$

und das ist im Wesentlichen die Aussage von Satz 5.3.1.

Bei dem Versuch, die Konvergenz der Energiezustände ϕ_{T_n} zu beweisen, wurde auch eine Darstellung der Wirkung der Leiteroperatoren als Determinante gefunden, siehe Satz A.0.6 im Anhang. Da sich jedes Element $a \in A^{(n)}$ der lokalen Algebra in der Tensorbasis entwickeln lässt als

$$a = \sum_{x,y} a_{x,y} |x\rangle\langle y|$$

für $|x\rangle = |x_1 \dots x_n\rangle = \otimes_{i=1}^n |x_i\rangle$ mit $x_i \in \{\uparrow, \downarrow\}$ (entsprechend für $|y\rangle$), kann die Wirkung von ϕ_{T_n} geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \phi_{T_n}(a) &= \langle T_n | a | T_n \rangle \\ &= \sum_{x,y} a_{x,y} \langle T_n | x \rangle \langle y | T_n \rangle . \end{aligned}$$

Es genügt also, das Skalarprodukt

$$\langle T_n | x \rangle = \langle \eta | \prod_{j \in T_n} B_j | x \rangle$$

für Vektoren $|x\rangle$ der Tensorbasis zu untersuchen. Satz A.0.6 liefert eine kompakte Formel für den Wert dieses Ausdrucks in Form der Determinante einer Streichungsmatrix der Transformationsmatrix $U^{(n)}$. Leider verhilft auch dieses Ergebnis zu keinem Beweis der oben geäußerten Vermutung.

Im Prinzip ist es möglich, die Konvergenz der durch \tilde{T} erzeugten Energiezustände numerisch zu testen. Innerhalb dieser Arbeit geschieht dies mit einem Mathematica-Programm (als "Notebook 1" im Anhang B zu finden).

*KAPITEL 5. SPINKETTEN-MODELLE MIT
LEITEROPERATORENSTRUKTUR*

Sei im Folgenden die inverse Temperatur stets $\beta = 1$. Dann ist die innere Energie der XY-Spinkette⁵ gegeben durch

$$u_{(\beta=1)} = 4 \int_0^1 \frac{\cos(\pi x)}{1 + e^{4 \cos(\pi x)}} dx = -1,1179418373401746433 \dots$$

Gesucht ist nun ein Intervall, über dem das Integral der Eigenwertdichtefunktion ungefähr $u_{(\beta=1)}$ ergibt. Man kann z.B. das Intervall $\tilde{T} = (0, \xi)$ wählen, wobei ξ gegeben ist durch

$$\xi = -\frac{1}{\pi} \arcsin\left(u_{(\beta=1)} \frac{\pi}{4}\right) = 0,341420280220345169 \dots$$

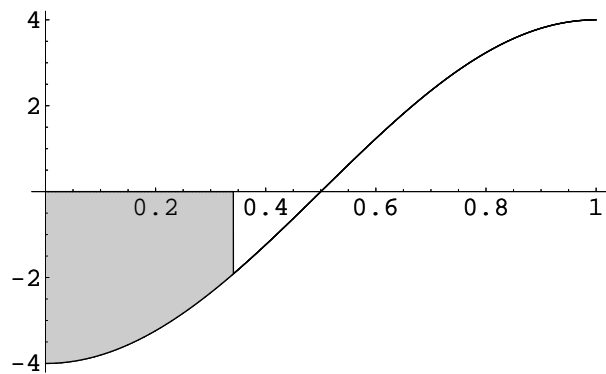


Abbildung 5.1: Das betrachtete Intervall der Eigenwertdichtefunktion

Dann ist

$$\int_{\tilde{T}} \lambda(x) dx = \int_0^\xi -4 \cos(\pi x) dx = -\frac{4}{\pi} \sin(\pi x) \Big|_0^\xi = u_{(\beta=1)} .$$

Berechnet man⁶ mit dem genannten Mathematica-Programm auf Ketten der Länge $s + n$ die Dichtematrix von $\phi_{T_{s+n}} \uparrow \mathcal{A}^{(s)}$ für $s = 1$ und $s = 2$, so erhält man die folgenden Ergebnisse:

⁵ Zur Berechnung der thermodynamischen Größen siehe Anhang Satz A.0.5.

⁶ Zu beachten ist, dass hier die Konvention $\uparrow = 0$, $\downarrow = 1$ verwendet wurde. So ist der "Vakuumanteil" der Zustände der Eintrag in der Matrix rechts unten.

*KAPITEL 5. SPINKETTEN-MODELLE MIT
LEITEROPERATORENSTRUKTUR*

$s+n$	$\phi_{T_{s+n}} \upharpoonright \mathcal{A}^{(1)}$	$\phi_{T_{s+n}} \upharpoonright \mathcal{A}^{(2)}$
1	$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	—
2	$\begin{pmatrix} 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
3	$\begin{pmatrix} 0,25 & 0 \\ 0 & 0,75 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,25 & 0,353553 & 0 \\ 0 & 0,353553 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,25 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} 0,138197 & 0 \\ 0 & 0,861803 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,138197 & 0,223607 & 0 \\ 0 & 0,223607 & 0,361803 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,5 \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} 0,33333 & 0 \\ 0 & 0,66667 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,0111645 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,322169 & 0,394338 & 0 \\ 0 & 0,394338 & 0,488835 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,177831 \end{pmatrix}$
6	$\begin{pmatrix} 0,228433 & 0 \\ 0 & 0,771567 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,00289306 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,22554 & 0,314701 & 0 \\ 0 & 0,314701 & 0,44332 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,328247 \end{pmatrix}$
7	$\begin{pmatrix} 0,161612 & 0 \\ 0 & 0,838388 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,000860199 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,160751 & 0,244426 & 0 \\ 0 & 0,244426 & 0,37414 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,464249 \end{pmatrix}$
8	$\begin{pmatrix} 0,284479 & 0 \\ 0 & 0,715521 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,0079708 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,276508 & 0,356193 & 0 \\ 0 & 0,356193 & 0,466034 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,249487 \end{pmatrix}$

Auch wenn eine gewisse Tendenz⁷ erkennbar ist, bleibt unklar, wie sich der Zustand mit steigendem $s + n$ verhält. Man ist mit $s + n = 8$ auch noch sehr weit vom thermodynamischen Limes entfernt; das Problem hier ist, dass der Rechenaufwand exponentiell mit der Länge der Kette steigt.

⁷ Beispielsweise sind einige Einträge immer Null, während sich der Eintrag links oben in den 4×4 -Matrizen knapp über der Null einzupendeln scheint.

5.4 Der QSM-Satz und Kombinatorik auf stetigen Funktionen

Die Ergebnisse zur Heisenbergschen XY-Kette deuten auf eine ungewöhnliche Anwendungsmöglichkeit des Quanten-Shannon-McMillan-Satzes in der klassischen Kombinatorik hin. Dieser Abschnitt gibt einen kurzen Ausblick auf diese Idee.

Satz 5.4.1 (Die Kombinatorik der XY-Eigenwertdichtefunktion)

Sei $\lambda(x) := -4 \cos(\pi x)$, sei $\beta \geq 0$ beliebig, und für jedes $n \in \mathbb{N}$ sei das Einheitsintervall $(0, 1)$ unterteilt in $n + 1$ Teilintervalle durch

$$X_n := \left\{ \frac{j}{n+1} \mid j \in \{1, \dots, n\} \right\} = \{x_1, \dots, x_n\} .$$

Jeder Teilmenge $T \subset \{1, \dots, n\}$ wird mit $\Sigma_n(T) := \sum_{i \in T} \lambda(x_i)$ die Wahrscheinlichkeit

$$P_n(T) := \frac{e^{-\beta \Sigma_n(T)}}{Z} \quad (5.12)$$

mit dem Normierungsfaktor $Z = \prod_{j=1}^n (1 + e^{-\beta \lambda(x_j)})$ zugeordnet. Dann gibt es für alle $\epsilon > 0$ ein $N_\epsilon \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N_\epsilon$ für die Zufallsgröße $\frac{1}{n} \Sigma_n$ gilt

$$P_n \left(\left| \frac{1}{n} \Sigma_n - u[\lambda] \right| < \epsilon \right) \geq 1 - \epsilon ,$$

wobei die Größe $u[\lambda]$ gegeben ist durch

$$u[\lambda] = \int_0^1 \frac{\lambda(x)}{1 + e^{\beta \lambda(x)}} dx .$$

Beweis: Nach Satz 5.1.1 generiert jede Teilmenge $T \subset \{1, \dots, n\}$ einen Energie-Eigenzustand $|T \rangle$ der XY-Kette der Länge n . Der dazugehörige Eigenwert lautet

$$E_T = \sum_{j \in T} \lambda_j = \sum_{j \in T} \lambda(x_j) = \Sigma_n(T) ,$$

und es gilt

$$\begin{aligned} \Psi_n(|T \rangle) &= \langle T | D_{\Psi_n} | T \rangle = \langle T | \frac{e^{-\beta H_n}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})} | T \rangle \\ &= \frac{e^{-\beta E_T}}{\text{tr}(e^{-\beta H_n})} = P_n(T) . \end{aligned}$$

Die Größe $u[\lambda]$ ist nach Satz A.0.5 gerade die innere Energiedichte der XY-Kette; aus diesem Satz folgt auch die Identität $Z = \text{tr}(e^{-\beta H_n})$. Deshalb

gibt es nach Satz 4.2.1 eine Folge $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u[\lambda]$, so dass der δ -typische Unterraum $T_\delta^{\Psi_n}$ für die lokalen Gibbszustände der XY-Kette gegeben ist durch

$$T_\delta^{\Psi_n} = \text{span} \left\{ U \text{ Eigenraum von } H_n \mid \frac{1}{n} E_U \in \left(u_n - \frac{\delta}{\beta}, u_n + \frac{\delta}{\beta} \right) \right\} .$$

Sei T eine Teilmenge mit

$$\left| \frac{1}{n} \Sigma_n(T) - u[\lambda] \right| < \epsilon .$$

Mit $\delta := \epsilon - \left| \frac{1}{n} \Sigma_n(T) - u[\lambda] \right|$ gibt es ein $N \in \mathbb{N}$, so dass für alle $n \geq N$ gilt: $|u[\lambda] - u_n| < \delta$. Es folgt

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{n} \Sigma_n(T) - u_n \right| &\leq \left| \frac{1}{n} \Sigma_n(T) - u[\lambda] \right| + |u[\lambda] - u_n| \\ &< \left| \frac{1}{n} \Sigma_n(T) - u[\lambda] \right| + \delta = \epsilon \end{aligned}$$

Daraus folgt aber $|T \rangle \in T_\epsilon^{\Psi_n}$, und nach Satz 4.1.1 weiterhin

$$\begin{aligned} P_n \left(\left| \frac{1}{n} \Sigma_n - u[\lambda] \right| < \epsilon \right) &\geq P_n (T \mid |T \rangle \in T_\epsilon^{\Psi_n}) \\ &= \Psi_n (T_\epsilon^{\Psi_n}) \geq 1 - \epsilon \end{aligned}$$

für alle $n \geq N_2$, wenn $N_2 \in \mathbb{N}$ groß genug ist. □

Dieser Satz hat eine einfache kombinatorische Interpretation; der Einfachheit halber wird hier zunächst der Fall⁸ $\beta = 0$ diskutiert. Man betrachte die Funktion $\lambda(x) = -4 \cos(\pi x)$ und die Zerlegung des Intervalls $(0, 1)$ in $n + 1$ Teilintervalle, wie im Satz angegeben. Nun wird aus den Punkten $\{x_1, \dots, x_n\}$ zufällig eine Teilmenge $T = \{t_1, \dots, t_k\}$ ausgewählt, wobei jede Teilmenge gleichwahrscheinlich sein soll. Man bildet nun die Summe der Funktionswerte über den Stellen $\{t_1, \dots, t_k\}$ und teilt durch n . Gesucht ist der Erwartungswert der resultierenden Zufallsvariablen $X := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k \lambda(t_k)$.

In Abb. 5.2 ist der Fall $n = 9$ dargestellt. Für zweielementige Teilmengen $\{t_1, t_2\} \subset \{x_1, \dots, x_n\}$ ist leicht zu sehen, dass es offenbar viele Möglichkeiten gibt, als Summe der Funktionswerte etwa Null zu erhalten (genauer gesagt die 4 Möglichkeiten, jeweils die Werte x und $1 - x$ auszuwählen, wie in Abb. 5.2 durch Graustufen angedeutet), während es nur wenige Möglichkeiten gibt, als Summe einen höheren Wert z.B. um die 8 herum zu erhalten

⁸ Der Fall $\beta = 0$ scheint auch der einzige zu sein, der sich auf einfache Weise kombinatorisch behandeln lässt, siehe Satz A.0.7 im Anhang. Für $\beta > 0$ ist offenbar eine thermodynamische Betrachtung wie diese hier am geeignetsten.

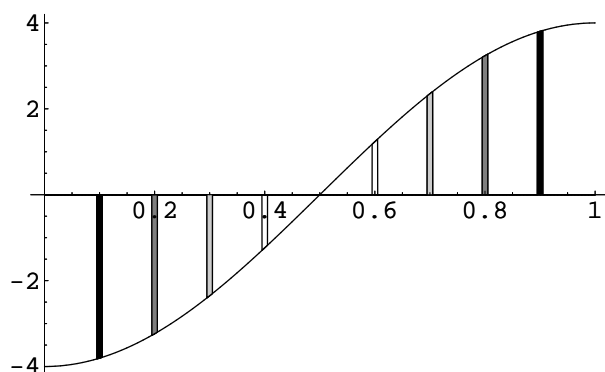


Abbildung 5.2: Kombinatorik auf der Eigenwertdichtefunktion

(dazu bleibt nur die Möglichkeit, die beiden x -Werte ganz rechts außen auszuwählen).

Man erwartet also, dass sich der Erwartungswert von X etwa um die Null einpendelt. Tatsächlich sagt Satz 5.4.1, dass der Erwartungswert von X für große n etwa gleich u ist, wobei sich hier für $\beta = 0$ ergibt:

$$u = \int_0^1 \frac{\lambda(x)}{1 + e^{0 \cdot \lambda(x)}} dx = \int_0^1 \frac{-4 \cos(\pi x)}{2} dx = 0 .$$

Zusätzlich folgt aus Satz 5.4.1, dass die Streuung um die Null für $n \rightarrow \infty$ immer kleiner wird. Für andere Temperaturen $\beta > 0$ ist die Interpretation des Satzes dieselbe, allerdings wird nicht mehr jede Teilmenge als gleich wahrscheinlich betrachtet, sondern die Teilmengen werden gemäß Gleichung (5.12) gewichtet.

Die Aussagen der Sätze 5.1.1 und 5.2.1 bleiben offenbar gültig (mit Ausnahme der Gestalt der Transformationsmatrix $U^{(n)}$ und der Eigenwerte λ_j), wenn im Hamilton-Operator von Gleichung (5.5) die Matrix $M^{(n)}$ durch eine andere Transfermatrix $\tilde{M}^{(n)}$ ersetzt wird. Eine solche Matrix beschreibt für die Fermion-Operatoren aus Gleichung (5.3) eine translationsinvariante

und endlichreichweitige Wechselwirkung, wenn sie folgende Gestalt⁹ hat:

$$\tilde{M}^{(n)} = \begin{pmatrix} m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & 0 & 0 & \dots \\ m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & 0 & \dots \\ 0 & m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & m_R & \dots \\ 0 & 0 & m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & m_2 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & m_1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & m_R & \dots & m_2 & m_1 & m_0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Wann immer eine Funktion $f(x)$ sich als Eigenwertdichtefunktion einer solchen Transfermatrix schreiben lässt, sollte die Gültigkeit von Satz 5.4.1 für $f(x)$ gewährleistet sein. Es bleibt zu untersuchen, für welche Klasse von Funktionen sich auf diese Weise das oben genannte kombinatorische Problem lösen lässt.

⁹ Dass eine solche Gestalt wirklich hinreichend *und* notwendig für die Translationsinvarianz und endliche Reichweite bei beliebigen Fermion-Operatoren ist, ist nicht klar. Eine solche Aussage bleibt noch zu beweisen.

Anhang A

Hilfssätze und Beweise

Satz A.0.2 (Subentropie-Abschätzung)

Sei $(p_i)_{i=1,\dots,d}$ eine Folge nichtnegativer, reeller Zahlen ($p_i \geq 0$) mit

$$\sum_{i=1}^d p_i = \mu \leq 1.$$

Dann folgt:

$$-\sum_{i=1}^d p_i \log p_i \leq \mu \log d - \mu \log \mu .$$

Beweis: Für beliebige reelle Zahlen $q_i \geq 0$ mit $\sum_i q_i = \mu$ sei ein μ -Analogon zur relativen Entropie definiert durch

$$\begin{aligned} H_\mu(p, q) &:= -\sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{q_i} \\ &\geq \sum_{i=1}^d p_i \left(1 - \frac{q_i}{p_i}\right) \\ &= \sum_{i=1}^d (p_i - q_i) = \mu - \mu = 0 . \end{aligned}$$

Der Ausdruck $H_\mu(p, q)$ ist also immer positiv. Insbesondere gilt dann für die Gleichverteilung $\frac{\mu}{d}$:

$$\begin{aligned} 0 &\leq H_\mu\left(p, \frac{\mu}{d}\right) = -\sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{\mu/d} = -\sum_{i=1}^d p_i \log p_i + \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{\mu}{d} \\ &= -\sum_{i=1}^d p_i \log p_i + \mu \log \mu - \mu \log d . \end{aligned}$$

□

Satz A.0.3 (Ungleichungen für Nicht-Eigenvektoren)

Sei Ψ ein Zustand auf $\mathcal{A}^{(n)}$ und sei $U \subset \mathcal{H}^{(n)}$ ein Unterraum, der eine Orthonormalbasis $(|i\rangle)_{i=1,\dots,d}$ aus Eigenvektoren von D_Ψ besitzt. Ist ein Intervall $I \subset [0, 1]$ gegeben, so dass

$$\Psi(|i\rangle\langle i|) \in I$$

für alle $i \in \{1, \dots, d\}$ gilt, so ist auch

$$\Psi(p) \in I$$

für alle Minimalprojektoren $p \leq p_U$, wobei p_U den Orthogonalprojektor auf U bezeichnet.

Beweis: Mit der Bezeichnung $D_\Psi|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$ wird

$$\begin{aligned} \Psi(p) &= \text{tr}(pD_\Psi) \\ &= \sum_i \langle i|pD_\Psi|i\rangle \\ &= \sum_i \lambda_i \langle i|p|i\rangle = \sum_i \lambda_i \mu_i \end{aligned} \tag{A.1}$$

mit $\mu_i := \langle i|p|i\rangle$. Da p ein Minimalprojektor ist, gilt $\text{tr}(p) = 1$, bzw.

$$\sum_i \mu_i = \sum_i \langle i|p|i\rangle = \text{tr}(p) = 1.$$

Wegen der Positivität aller p sind die $\mu_i \geq 0$, so dass es sich bei Gleichung (A.1) um eine Konvexkombination der λ_i handelt. Da alle λ_i im Intervall I liegen, muss auch die Konvexkombination der λ_i in I enthalten sein. \square

Satz A.0.4 (Diagonalisierung der XY-Transfermatrix)

Ist die $n \times n$ -Transfermatrix $M^{(n)}$ gegeben durch

$$M_{ij}^{(n)} = \begin{cases} -2 & \text{für } i - j = \pm 1 \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

so wird $M^{(n)}$ unitär diagonalisiert durch die Transformationsmatrix

$$U_{jk}^{(n)} = \frac{\sqrt{2} \sin \frac{jk\pi}{n+1}}{\sqrt{n+1}},$$

wobei die Eigenwerte λ_k durch Gleichung (5.7) gegeben sind.

Beweis: Die Eigenvektorgleichung für $M^{(n)}$

$$M^{(n)}|v\rangle = \lambda|v\rangle$$

mit $|v\rangle = (v_1, \dots, v_n)$ ist äquivalent zu folgendem System von Gleichungen:

$$\lambda v_1 = -2v_2 \tag{A.2}$$

$$\lambda v_k = -2(v_{k-1} + v_{k+1}) \quad \text{für alle } k \in \{2, \dots, n-1\} \tag{A.3}$$

$$\lambda v_n = -2v_{n-1} . \tag{A.4}$$

Die Differenzgleichung (A.3) ist in ihrer Struktur mit der Bestimmungsgleichung der Fibonaccizahlen vergleichbar; die folgende Lösung dieser Gleichung erinnert daher stark an das bekannte Verfahren zur Berechnung einer allgemeinen Formel dieser Zahlen.

Definiert man für $k \in \{1, \dots, n-1\}$ den Vektor

$$\vec{x}_k := \begin{pmatrix} v_k \\ v_{k+1} \end{pmatrix} ,$$

so können die Gleichungen (A.2) und (A.3) umgeschrieben werden als

$$\begin{aligned} \vec{x}_1 &= \begin{pmatrix} v_1 \\ -\frac{\lambda}{2}v_1 \end{pmatrix} , \\ \vec{x}_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -\frac{\lambda}{2} \end{pmatrix} \vec{x}_{k-1} =: B\vec{x}_{k-1} = B^{k-1}\vec{x}_1 . \end{aligned} \tag{A.5}$$

Die Matrixpotenz B^{k-1} in Gleichung (A.5) kann durch Diagonalisierung von B explizit ausgerechnet werden. Beim Ausführen der Diagonalisierung stößt man auf Terme der Form $\sqrt{\lambda^2 - 16}$, was die Substitution

$$\lambda = -4 \cos a \tag{A.6}$$

mit noch unbekanntem Parameter a nahelegt. Durch Einsetzen von (A.6) in (A.5) und anschließender Diagonalisierung ergibt sich

$$v_k = v_1 \frac{\sin(ak)}{\sin a} . \tag{A.7}$$

Die verbleibende Gleichung (A.4) ist dann eine "Randbedingung", die noch Einschränkungen an den Parameter a liefert. Einsetzen von (A.7) und (A.6) in (A.4) liefert

$$2 \cos a \sin(an) = \sin(a(n-1)) ,$$

und das ist äquivalent zu $\sin(a(n+1)) = 0$ oder

$$a = \frac{j\pi}{n+1} \quad \text{mit } j \in \mathbb{Z} .$$

Setzt man noch $v_1 = \sin a$, so erhält man als Ergebnis, dass die Vektoren

$$v^{(j)} = \left(\sin \left(\frac{j\pi}{n+1} k \right) \right)_{k=1, \dots, n}$$

für jedes $j \in \{1, \dots, n\}$ Eigenvektoren von $M^{(n)}$ sind. Diese Vektoren sind zueinander orthogonal und haben Betrag $\sqrt{\frac{n+1}{2}}$:

$$\begin{aligned} \langle v^{(l)}, v^{(m)} \rangle &= \sum_{k=1}^n v_k^{(l)*} v_k^{(m)} \\ &= \sum_{k=1}^n \sin \frac{l\pi k}{n+1} \sin \frac{m\pi k}{n+1} \\ &= \begin{cases} \frac{n+1}{2} & \text{für } m = l \\ 0 & \text{für } m \neq l . \end{cases} \end{aligned}$$

Die Vektoren $\left(\sqrt{\frac{2}{n+1}} v^{(j)} \right)_{j=1, \dots, n}$ bilden also eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren von $M^{(n)}$ und sind die Spalten der gesuchten unitären Diagonalisierungsmatrix $U^{(n)}$. \square

Satz A.0.5 (Thermodynamische Größen der XY-Kette)

Für das XY-Modell mit dem lokalen Hamilton-Operator (5.2) sind die thermodynamischen Größen "pressure" p , freie Energie f , innere Energie u und Entropie s bei der inversen Temperatur β gegeben durch

$$\begin{aligned} p &= \int_0^1 \log \left(1 + e^{4\beta \cos(\pi x)} \right) dx , \\ f &= -\beta^{-1} \int_0^1 \log \left(1 + e^{4\beta \cos(\pi x)} \right) dx , \\ u &= 4 \int_0^1 \frac{\cos(\pi x)}{1 + e^{4\beta \cos(\pi x)}} dx , \\ s &= \int_0^1 \left(\frac{4\beta \cos(\pi x)}{1 + e^{4\beta \cos(\pi x)}} + \log \left(1 + e^{4\beta \cos(\pi x)} \right) \right) dx . \end{aligned}$$

Beweis: Der Beweis orientiert sich, genau wie Abschnitt 5.1, am Buch von Barry Simon ([16]). Sind die λ_j Eigenwerte der Transfermatrix $M^{(n)}$ (siehe Gleichung (5.7)), so erhält man zunächst durch Ausmultiplizieren

$$\prod_{j=1}^n \left(1 + e^{-\beta \lambda_j} \right) = \sum_{T \subset \{1, \dots, n\}} e^{-\beta \sum_{t \in T} \lambda_t} = \text{tr} \left(e^{-\beta H_n} \right) .$$

Also ist

$$p \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \text{tr} \left(e^{-\beta H_n} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \log \left(1 + e^{-\beta \lambda \left(\frac{j}{n+1} \right)} \right)$$

mit der Eigenwertdichtefunktion $\lambda(x) = -4 \cos(\pi x)$. Diese Summe konvergiert wegen der Stetigkeit von $\lambda(x)$ gegen das angegebene Integral.

Die anderen thermodynamischen Größen ergeben sich dann sofort aus den Gleichungen

$$\begin{aligned} f &= -\beta^{-1}p , \\ u &= -\frac{\partial}{\partial \beta}p , \\ s &= \beta u + p , \end{aligned}$$

vgl. in [14] die Identitäten von Satz 7.3. □

Satz A.0.6 (Determinantendarstellung der Leiteroperatoren)

Für das XY-Modell mit dem Hamilton-Operator H_n aus Gleichung (5.2), dem Vakuumzustand $|\eta \rangle = |\downarrow \rangle^{\otimes n}$ und den Vernichtungsoperatoren B_j aus Gleichung (5.8) gilt für alle Vektoren $|x \rangle$ der Tensorbasis (d.h. $|x \rangle = |x_1 \dots x_n \rangle$ mit $x_i \in \{\uparrow, \downarrow\}$)

$$\langle \eta | \prod_{j \in T} B_j |x \rangle = \left(\frac{2}{n+1} \right)^{\frac{\#T}{2}} \det \left(\sin \frac{j_l \uparrow_m (|x \rangle) \pi}{n+1} \right)_{l,m=1,\dots,\#T}$$

für alle Teilmengen $T \subset \{1, \dots, n\}$, wann immer

$$\#T = \#\{i \in \{x_1, \dots, x_n\} \mid x_i = \uparrow\}$$

erfüllt ist (d.h. die Mächtigkeit von T muss gleich der Anzahl der Up-Spins in $|x \rangle$ sein); andernfalls ist der Wert des Skalarprodukts gleich Null. Dabei steht $\uparrow_m (|x \rangle)$ für den Index des m -ten Up-Spins in der Folge (x_1, \dots, x_n) . Das Produkt wird in absteigender Reihenfolge ausgeführt.

Beweis: Es werden sämtliche Bezeichnungen aus Kapitel 5.1 verwendet, aber im Gegensatz zu dort mit der hier zweckmäßigeren Konvention

$$\downarrow = 0 \quad , \quad \uparrow = 1 .$$

Zunächst stellt man fest, dass

$$\sigma_m^- |x_\mu \rangle_{\mu=1,\dots,n} = x_m |((1 - \delta_{\mu m})x_\mu) \rangle_{\mu=1,\dots,n} , \tag{A.8}$$

denn

$$\sigma_m^- |x_1, \dots, x_n \rangle = \begin{cases} 0 & \text{falls } x_m = \downarrow , \\ |x_1, \dots, x_{m-1}, \downarrow, x_{m+1}, \dots, x_n \rangle & \text{falls } x_m = \uparrow . \end{cases}$$

Außerdem gilt

$$\alpha_l |x_1, \dots, x_n \rangle = (-1)^{x_l} |x_1, \dots, x_n \rangle ; \tag{A.9}$$

dies folgt aus

$$\alpha_l |x_1, \dots, x_n \rangle = (\mathbf{1} - 2\sigma_l^+ \sigma_l^-) |x \rangle = \begin{cases} |x_1, \dots, x_n \rangle & \text{für } x_l = \downarrow, \\ -|x_1, \dots, x_n \rangle & \text{für } x_l = \uparrow. \end{cases}$$

Durch mehrfache Anwendung von (A.8) und (A.9) erhält man für die Wirkung eines Fermion-Operators A_j auf $|x \rangle$

$$\begin{aligned} A_j |x \rangle &= \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{j-1} \sigma_j^- |x_1, \dots, x_n \rangle \\ &= \sigma_j^- \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{j-1} |x_1, \dots, x_n \rangle \\ &= \sigma_j^- (-1)^{x_1} (-1)^{x_2} \dots (-1)^{x_{j-1}} |x_1, \dots, x_n \rangle \\ &= (-1)^{\sum_{i=1}^{j-1} x_i} x_j |((1 - \delta_{\mu j}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Mehrfache Anwendung von (A.10) liefert den ein wenig unübersichtlichen Ausdruck

$$\begin{aligned} A_{k_N} \dots A_{k_2} A_{k_1} |x \rangle &= A_{k_N} \dots A_{k_2} x_{k_1} (-1)^{\sum_{\nu=1}^{k_1-1} x_\nu} |((1 - \delta_{\mu k_1}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle \\ &= A_{k_N} \dots A_{k_3} x_{k_1} (-1)^{\sum_{\nu=1}^{k_1-1} x_\nu} (1 - \delta_{k_2 k_1}) x_{k_2} \\ &\quad (-1)^{\sum_{\nu=1}^{k_2-1} (1 - \delta_{\nu k_1}) x_\nu} |((1 - \delta_{\mu k_2})(1 - \delta_{\mu k_1}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle \\ &= A_{k_N} \dots A_{k_4} x_{k_1} x_{k_2} (-1)^{\sum_{\nu=1}^{k_1-1} x_\nu + \sum_{\nu=1}^{k_2-1} (1 - \delta_{\nu k_1}) x_\nu} \\ &\quad (1 - \delta_{k_2 k_1})(1 - \delta_{k_3 k_2})(1 - \delta_{k_3 k_1}) x_{k_3} \\ &\quad (-1)^{\sum_{\nu=1}^{k_3-1} (1 - \delta_{\nu k_2})(1 - \delta_{\nu k_1}) x_\nu} \\ &\quad |((1 - \delta_{\mu k_3})(1 - \delta_{\mu k_2})(1 - \delta_{\mu k_1}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle \\ &= x_{k_N} \dots x_{k_1} [-1]_{|x \rangle}^{k_N, \dots, k_1} |((1 - \delta_{\mu k_1}) \dots (1 - \delta_{\mu k_N}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

wobei $[-1]_{|x \rangle}^{k_N, \dots, k_1} \in \{-1, 0, 1\}$ gegeben ist durch

$$\begin{aligned} [-1]_{|x \rangle}^{k_N, \dots, k_1} &= \prod_{\beta < \gamma \in \{1, \dots, N\}} (1 - \delta_{k_\gamma k_\beta}) \\ &\quad \cdot (-1)^{\sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=1}^{k_\mu-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_1})(1 - \delta_{\nu k_2}) \dots (1 - \delta_{\nu k_{\mu-1}})}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Im Folgenden wird das Skalarprodukt $\langle \eta | A_{k_N} \dots A_{k_1} |x \rangle$ benötigt. Sind die $(k_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ paarweise verschieden voneinander, so gilt

$$\langle \eta | A_{k_N} \dots A_{k_1} |x \rangle = \begin{cases} [-1]_{|x \rangle}^{k_N, \dots, k_1} & \text{falls } x_\mu = \begin{cases} \uparrow & \text{für } \mu \in \{k_1, \dots, k_N\} \\ \downarrow & \text{für } \mu \notin \{k_1, \dots, k_N\} \end{cases} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

(andernfalls - bei zwei gleichen k_i - muss das Skalarprodukt wegen Gleichung (A.12) verschwinden). Damit nämlich

$$\langle \eta | ((1 - \delta_{\mu k_1}) \dots (1 - \delta_{\mu k_N}) x_\mu)_{\mu=1, \dots, n} \rangle \neq 0$$

erfüllt ist, muss $0 = (1 - \delta_{\mu k_1}) \dots (1 - \delta_{\mu k_N}) x_\mu$ für alle $\mu \in \{1, \dots, n\}$ gelten, und das führt nach kurzer Rechnung zu der in (A.13) genannten Bedingung.

Mit der Definition für die Vernichtungsoperatoren B_j (5.8) erhält man insgesamt

$$\begin{aligned} \langle \eta | \prod_{j \in T} B_j | x \rangle &= \langle \eta | B_{j_N} B_{j_{N-1}} \dots B_{j_2} B_{j_1} | x \rangle \\ &= \langle \eta | \sum_{k_N=1}^n U_{j_N k_N} A_{k_N} \dots \sum_{k_2=1}^n U_{j_2 k_2} A_{k_2} \sum_{k_1=1}^n U_{j_1 k_1} A_{k_1} | x \rangle \\ &= \sum_{k_1, \dots, k_N} U_{j_N k_N} \dots U_{j_1 k_1} \langle \eta | A_{k_N} \dots A_{k_1} | x \rangle . \end{aligned}$$

Ist nun $N \neq \#\{y \in \{x_1, \dots, x_n\} \mid y = \uparrow\}$, so ist die Bedingung aus Gleichung (A.13) für keine mögliche Wahl von (k_1, \dots, k_N) erfüllbar, und der Ausdruck wird immer Null. Andernfalls ergibt sich

$$\langle \eta | \prod_{j \in T} B_j | x \rangle = \sum_{\substack{(k_1, \dots, k_N) \\ \text{Permutation von} \\ (\uparrow_1(|x\rangle), \dots, \uparrow_N(|x\rangle))}} U_{j_N k_N} \dots U_{j_1 k_1} [-1]_{|x\rangle}^{k_N, \dots, k_1} . \quad (\text{A.14})$$

Gesucht ist nun noch ein expliziter Ausdruck für $[-1]_{|x\rangle}^{k_N, \dots, k_1}$. Da die k_i alle unterschiedlich sind, fällt das Produkt aus Gleichung (A.12) weg, und es bleibt übrig

$$[-1]_{|x\rangle}^{k_N, \dots, k_1} = (-1)^{\sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=1}^{k_\mu-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_1}) (1 - \delta_{\nu k_2}) \dots (1 - \delta_{\nu k_{\mu-1}})} =: (-1)^{\Sigma_x^k}$$

mit $k := (k_N, \dots, k_1)$. Es wird nun das Verhalten dieses Ausdrucks gegenüber Vertauschungen der k_i untersucht. Es genügt, Vertauschungen zweier benachbarter k_i zu betrachten, da jede andere Vertauschung sich durch Hintereinanderausführung benachbarter Vertauschungen darstellen lässt. Sei also

$$k = (k_N, k_{N-1}, \dots, k_{l+1}, k_l, \dots, k_1) ,$$

und

$$\tilde{k} := (k_N, k_{N-1}, \dots, k_l, k_{l+1}, \dots, k_1) .$$

Gegeben sei der Ausdruck

$$\Sigma_x^k(\mu) := \sum_{\nu=1}^{k_\mu-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_1}) (1 - \delta_{\nu k_2}) \dots (1 - \delta_{\nu k_{\mu-1}}) ,$$

so dass

$$\Sigma_x^k = \sum_{\mu=1}^N \Sigma_x^k(\mu) .$$

Man sieht sofort, dass für $\mu \leq l - 1$ sich an den Summanden $\Sigma_x^k(\mu)$ durch die Vertauschung nichts ändert, d.h. $\Sigma_x^{\tilde{k}}(\mu) = \Sigma_x^k(\mu)$, denn k_l und k_{l+1} tauchen in der entsprechenden Summe überhaupt nicht auf.

Gleiches gilt für $\mu \geq l + 2$; die einzige Änderung ist ein Vertauschen der Ausdrücke $(1 - \delta_{\nu k_l})$ und $(1 - \delta_{\nu k_{l+1}})$ unter der Summe, was den Summenwert nicht ändert. Also ist

$$\Sigma_x^{\tilde{k}} - \Sigma_x^k = \Sigma_x^{\tilde{k}}(l) - \Sigma_x^k(l) + \Sigma_x^{\tilde{k}}(l+1) - \Sigma_x^k(l+1) . \quad (\text{A.15})$$

Sei nun ohne Beschränkung der Allgemeinheit $k_{l+1} > k_l$ (der umgekehrte Fall lässt sich analog behandeln). Dann ergibt sich

$$\begin{aligned} \Sigma_x^k(l+1) &= \sum_{\nu=1}^{k_{l+1}-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_1}) \dots (1 - \delta_{\nu k_{l-1}}) (1 - \delta_{\nu k_l}) \\ &= \sum_{\nu=1}^{\tilde{k}_l-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_1}) \dots (1 - \delta_{\nu k_{l-1}}) (1 - \delta_{\nu \tilde{k}_{l+1}}) \\ &= \sum_{\nu=1}^{\tilde{k}_l-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu \tilde{k}_1}) \dots (1 - \delta_{\nu \tilde{k}_{l-1}}) - x_{\tilde{k}_{l+1}} \\ &= \Sigma_x^{\tilde{k}}(l) - x_{k_l} . \end{aligned}$$

Entsprechend kann man berechnen

$$\begin{aligned} \Sigma_x^{\tilde{k}}(l+1) &= \sum_{\nu=1}^{\tilde{k}_{l+1}-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu \tilde{k}_1}) \dots (1 - \delta_{\nu \tilde{k}_l}) \\ &= \sum_{\nu=1}^{k_l-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_{l+1}}) (1 - \delta_{\nu k_{l-1}}) \dots (1 - \delta_{\nu k_1}) \\ &= \sum_{\nu=1}^{k_l-1} x_\nu (1 - \delta_{\nu k_{l-1}}) \dots (1 - \delta_{\nu k_1}) \\ &= \Sigma_x^k(l) , \end{aligned}$$

denn wegen $k_{l+1} > k_l$ ist $\delta_{\nu k_{l+1}} = 0$. Einsetzen in (A.15) liefert

$$\Sigma_x^{\tilde{k}} - \Sigma_x^k = \Sigma_x^{\tilde{k}}(l) - \Sigma_x^k(l) + \Sigma_x^k(l) - \Sigma_x^{\tilde{k}}(l) + x_{k_l} = x_{k_l} = 1 .$$

Damit ändern Vertauschungen gerade das Vorzeichen des Ausdrucks $[-1]_{|x>}^{k_N, \dots, k_1}$, d.h.

$$[-1]_{|x>}^k = -[-1]_{|x>}^{\tilde{k}} . \quad (\text{A.16})$$

Weiterhin gilt: Ist $k_1 < k_2 < \dots < k_N$, so ist $\Sigma_x^k(\mu) = 0$ für alle μ , und daher

$$[-1]_{|x\rangle}^k \text{ geordnet} = 1 . \quad (\text{A.17})$$

Aus Gleichungen (A.16) und (A.17) folgt zusammen, dass $[-1]_{|x\rangle}^k$ das Vorzeichen der Permutation von (k_1, \dots, k_N) sein muss, d.h.

$$[-1]_{|x\rangle}^{k_N, \dots, k_1} = \text{sign}(k_1, \dots, k_N) .$$

Setzt man dieses Resultat in Gleichung (A.14) ein und verwendet die Leibniz-Formel für die Determinante einer $n \times n$ -Matrix A

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sign}(\sigma) \cdot a_{1\sigma(1)} \cdot \dots \cdot a_{n\sigma(n)} ,$$

wobei S_n die Gruppe aller n -Permutationen bezeichnet, so erhält man

$$\begin{aligned} \langle \eta | \prod_{j \in T} B_j | x \rangle &= \sum_{\substack{(k_1, \dots, k_N) \\ \text{Permutation von} \\ (\uparrow_1(|x\rangle), \dots, \uparrow_N(|x\rangle))}} U_{j_N k_N} \dots U_{j_1 k_1} \text{sign}(k_1, \dots, k_N) \\ &= \sum_{\sigma \in S_n} \tilde{U}_{N\sigma(N)} \dots \tilde{U}_{1\sigma(1)} \text{sign}(k_1, \dots, k_N) = \det \tilde{U} \end{aligned}$$

mit $\tilde{U}_{lm} := U_{j_l \uparrow_m(|x\rangle)}$. Mit dem expliziten Ausdruck (5.6) für U ergibt sich die Behauptung. \square

Satz A.0.7 (Kombinatorik auf stetigen Funktionen für $\beta = 0$)

Sei $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ stückweise stetig, und für jedes $n \in \mathbb{N}$ sei das Einheitsintervall $(0, 1)$ unterteilt in $n + 1$ Teilintervalle durch

$$X_n := \left\{ \frac{j}{n+1} \mid j \in \{1, \dots, n\} \right\} = \{x_1, \dots, x_n\} .$$

Sei auf der Menge aller Teilmengen $2^{X_n} := \{M \mid M \subset X_n\}$ die Gleichverteilung gegeben, d.h. der Wahrscheinlichkeitsraum lautet

$$(2^{X_n}, 2^{-n}) .$$

Dann gilt für den Erwartungswert der Zufallsgröße $\frac{1}{n} \sum_{x \in T} f(x)$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E \left(\frac{1}{n} \sum_{x \in T} f(x) \right) = \frac{1}{2} \int_0^1 f(x) dx .$$

Beweis: Für festes n ist auf der Menge aller stückweise stetigen Funktionen $[0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ wegen

$$\begin{aligned} E\left(\frac{1}{n} \sum_{x \in T} f(x)\right) &= \sum_{T \in 2^{X_n}} P(T) \frac{1}{n} \sum_{x \in T} f(x) \\ &= \frac{2^{-n}}{n} \sum_{T \in 2^{X_n}} \sum_{x \in T} f(x) \end{aligned}$$

der Erwartungswert ein lineares (und bezüglich der Supremumsnorm stetiges) Funktional (im Folgenden mit $\mathcal{E}[f]$ bezeichnet). Aus diesem Grund ist es möglich, f in eine Linearkombination bestimmter Basisfunktionen zu zerlegen. Als zweckmäßig erweist sich hier die Indikatorfunktion

$$\mathbf{1}_{[a,b]}(x) := \begin{cases} 1 & \text{falls } x \in [a, b) \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{1}_{[a,b]}) &= \frac{2^{-n}}{n} \sum_{T \in 2^{X_n}} \sum_{x \in T \cap [a,b)} 1 \\ &= \frac{2^{-n}}{n} \sum_{T \in 2^{X_n}} \#(T \cap [a, b)) . \end{aligned}$$

Sei n_i die Anzahl der Punkt der Zerlegung im Intervall $[a, b)$, d.h.

$$n_i := \#X_n \cap [a, b) .$$

Beschränkt man die Betrachtung auf alle k -Teilmengen von X_n , so gibt es

- $\binom{n-n_i}{k}$ k -Teilmengen mit $\#T \cap [a, b) = 0$,
- $\binom{n_i}{1} \binom{n-n_i}{k-1}$ k -Teilmengen mit $\#T \cap [a, b) = 1$,
- $\binom{n_i}{2} \binom{n-n_i}{k-2}$ k -Teilmengen mit $\#T \cap [a, b) = 2$,
- ...
- $\binom{n_i}{k} \binom{n-n_i}{0}$ k -Teilmengen mit $\#T \cap [a, b) = k$.

Also ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{1}_{[a,b]}) &= \frac{2^{-n}}{n} \sum_{k=1}^n \sum_{l=0}^k \binom{n_i}{l} \binom{n-n_i}{k-l} l \\ &= \frac{2^{-n}}{n} n_i \sum_{k=1}^n \binom{n-1}{k-1} = \frac{n_i}{2n} . \end{aligned}$$

Da die Funktion f nur an den Stellen $(x_i)_{i=1,\dots,n}$ ausgewertet wird, kann sie durch eine Treppenfunktion \tilde{f} ersetzt werden, ohne dass sich der Wert des Funktional $\mathcal{E}[f]$ ändert: Mit

$$\tilde{f}(x) := \begin{cases} f(\max\{x_i \in X_n \mid x_i \leq x\}) & \text{für } x \geq x_1 \\ f(0) & \text{für } x < x_1 \end{cases}$$

ist $f(x_i) = \tilde{f}(x_i)$ für alle $x_i \in X_n$, und damit $\mathcal{E}[f] = \mathcal{E}[\tilde{f}]$. Die Treppenfunktion \tilde{f} kann als eine Linearkombination von Indikatorfunktionen $\mathbf{1}_{[a,b]}$ geschrieben werden

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathbf{1}_{[\frac{i}{n+1}, \frac{i+1}{n+1})},$$

wenn man noch $x_0 := 0$ setzt. Man erhält also

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[f] &= \mathcal{E}[\tilde{f}] = \sum_{i=0}^n f(x_i) \mathcal{E} \left[\mathbf{1}_{[\frac{i}{n+1}, \frac{i+1}{n+1})} \right] \\ &= \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot \frac{1}{2n} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} f \left(\frac{i}{n+1} \right). \end{aligned}$$

Wegen der stückweisen Stetigkeit von f konvergiert letzterer Ausdruck für $n \rightarrow \infty$ gegen das Riemann-Integral $\frac{1}{2} \int_0^1 f(x) dx$. \square

Anhang B

Mathematica-Notebooks

Bei der Auflistung der beiden Mathematica-Programme wurde folgende Konvention verwendet:

- Kommentare sind kursiv gesetzt,
- Programmzeilen sind in normaler Schrift gehalten, und
- Ausgaben von Mathematica sind durch einen Pfeil gekennzeichnet.

Notebook 1: Numerischer Test der Intervallzustands-Konvergenz auf der Heisenbergschen XY-Kette

(Wenn die Variable "Ausgabe" auf 0 gesetzt wird, werden die Zwischenergebnisse (Matrizen usw.) nicht mehr angezeigt. Das ist wichtig ab etwa $n \geq 5$, da sonst die Matrizen zu groß werden und die Laufzeit zu lang wird *)*

Ausgabe=0;

(Folgender Parameter gibt die Gesamtlänge der Kette an; nach der Notation in Abschnitt 5.3 ist dies eigentlich gleich $s+n$ *)*

n=6

→ 6

(Hier wird die inverse Temperatur β festgelegt: *)*

$\beta = 1$

→ 1

<<DiscreteMath'Combinatorica'

(Zuerst wird das Tensorprodukt von Matrizen definiert: *)*

kron[u_/;MatrixQ[u],v_/;MatrixQ[v]]:=Module[{w},w=Outer[Times,u,v];

Partition[Flatten[Transpose[w,{1,3,2,4}],Dimensions[w][[2]] Dimensions[w][[4]]];

SetAttributes[kron,OneIdentity];

kron[u_,v_,w_]:=Fold[kron,u,{v,w}];

MatrixTensorProduct=kron;

(* Man muss Mathematica auch beibringen, wie man die adjungierte Matrix berechnet *)

Adjoint[X_]:=Conjugate[Transpose[X]]

(* Hier sind die Pauli-Spin-Matrizen an den Stellen $1 \leq i \leq n$. *)

$\sigma x[i_]:=Module[\{a,k\},If[i=1,a=\{\{0,1\},\{1,0\}\},a=\{\{1,0\},\{0,1\}\}];$

For[k=2,k<=n,k++,If[k==i,a=MatrixTensorProduct[a,\{\{0,1\},\{1,0\}\}],

a=MatrixTensorProduct[a,\{\{1,0\},\{0,1\}\}]];a]

$\sigma y[i_]:=Module[\{a,k\},If[i=1,a=\{\{0,-1\},\{1,0\}\},a=\{\{1,0\},\{0,1\}\}];$

For[k=2,k<=n,k++,If[k==i,a=MatrixTensorProduct[a,\{\{0,-1\},\{1,0\}\}],

1,\{1,0\}\}],a=MatrixTensorProduct[a,\{\{1,0\},\{0,1\}\}]];a]

(* Das ist der Hamilton-Operator des XY-Modells: *)

$H = -\sum_{i=1}^{n-1} (\sigma x[i].\sigma x[i+1] + \sigma y[i].\sigma y[i+1]);$

If[Ausgabe==1,H//MatrixForm]

(* Nun werden noch die Freien-Fermionen-Operatoren gebraucht [vgl. Barry Simon, S.141] : *)

$\sigma plus[i_]:=1/2(\sigma x[i]+I \sigma y[i])$

$\sigma minus[i_]:=1/2(\sigma x[i]-I \sigma y[i])$

$A[j_]:=Module[\{B\},If[j==1,B=\sigma minus[j],$

B=MatrixExp[IPi\sum_{k=1}^{j-1}(\sigma plus[k].\sigma minus[k]).\sigma minus[j]];B]

(* Hier kann überprüft werden, dass H auch mit Hilfe der Erzeuger und Vernichter geschrieben werden kann: *)

$H=-2\sum_{k=1}^{n-1}(Adjoint[A[k+1]].A[k]-A[k+1].Adjoint[A[k]])$

→ True

(* Das hier ist die Wechselwirkungsmatrix M: *)

$MM=Table[(-2)*KroneckerDelta[1,(i-j)^2],\{i,1,n\},\{j,1,n\}];$

If[Ausgabe==1,MM//MatrixForm]

(* Man kann auch folgende Form der Darstellung von H überprüfen lassen: *)

$H == \sum_{i=1}^n (\sum_{k=1}^n MM[i,k] Adjoint[A[i]].A[k])$

→ True

(* Hier ist die unitäre Transformationsmatrix für den Übergang von A nach B: *)

$U=Table[N[\frac{\sqrt{2} \sin[\frac{ij\pi}{n+1}}]{\sqrt{n+1}},\{i,1,n\},\{j,1,n\}];$

MMEigensystem={Table[N[-4 Cos[j Pi/(n+1)]],\{j,1,n\}],\{\}};

If[Ausgabe==1,U//MatrixForm]

(* Hier wird überprüft, dass U auch wirklich unitär ist; der folgende Ausdruck muss sehr klein sein: *)

Norm[IdentityMatrix[n]-U.Adjoint[U]]

→ 2.96374×10^{-16}

(* Folgendermaßen werden die B_j konstruiert: *)

$B[i_]:= \sum_{j=1}^n (U[[i,j]]A[j])$

(* Hier wird der Vakuumzustand generiert, bei dem alle Spins nach "unten" zeigen: *)

```

η=Table[KroneckerDelta[k,2^n],{k,1,2^n}];
If[Ausgabe==1,η]
u=-1.1179418373401746432622568640666729214'20.;
ξ=-1/Pi ArcSin[u Pi/4]
→0.3411420280220345169

```

(* Jetzt wird der vom Intervall T_n erzeugte Zustand $|v\rangle$ berechnet: *)

```

v=η;For[i=1,i≤Floor[(n+1)*ξ],i++,v=Adjoint[B[i]].v]
v
→{0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.0537872,0.,0.,0.,0.,0.,0.163993,
0.,0.,0.,0.271567,0.,0.295505,0.193842,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.174646,0.,0.,0.,
0.368488,0.,0.43556,0.295505,0.,0.,0.,0.241717,0.,0.368488,0.271567,0.,
0.,0.174646,0.163993,0.,0.0537872,0.,0.,0.}

```

(* Jetzt wird die Dichtematrix des Zustandes auf $A^{(s)}$ berechnet: *)

```

s=2;PhiReduced=Table[v.(MatrixTensorProduct[Table[KroneckerDelta[k,i]
KroneckerDelta[l,j],{k,1,2^s},{l,1,2^s}],IdentityMatrix[2^{n-s}]].v),{i,1,2^s},{j,1,2^s}];
PhiReduced//MatrixForm
→
(
0, 00289306      0      0      0
0      0, 22554    0, 314701    0
0      0, 314701    0, 44332     0
0      0      0      0, 328247
)

```

Notebook 2: Visualisierung der AEP bei einem ferromagnetischen Modell

(* Dieses Notebook berechnet die Eigenwerte des Gibbszustandes des Heisenberg-Modells der Länge n mit untengenanntem Hamilton-Operator. Ziel ist die Visualisierung der AEP mit steigendem n , und die numerische Nachprüfung der Zusammenhänge verschiedener thermodynamischer Größen *)

```

kron[u_/:MatrixQ[u],v_/:MatrixQ[v]]:=Module[{w},w=Outer[Times,u,v];
Partition[Flatten[Transpose[w,{1,3,2,4}]],Dimensions[w][[2]] Dimensions[w][[4]]];
SetAttributes[kron,OneIdentity];
kron[u_,v_,w_]:=Fold[kron,u,{v,w}];
MatrixTensorProduct=kron;
n=5
→5

```

(* Hier werden die Pauli Spin-Matrizen definiert: *)

```

σx[i_]:=Module[{a,k},If[i=1,a={{0,1},{1,0}},a={{1,0},{0,1}}];
For[k=2,k≤n,k++,If[k==i,a=MatrixTensorProduct[a,{{0,1},{1,0}}],
a=MatrixTensorProduct[a,{{1,0},{0,1}}]];a]
σy[i_]:=Module[{a,k},If[i=1,a={{0,-I},{I,0}},a={{1,0},{0,1}}];
For[k=2,k≤n,k++,If[k==i,a=MatrixTensorProduct[a,{{0,-I},{I,0}}],

```

```

a=MatrixTensorProduct[a,{1,0},{0,1}]]];a]
σz[i_]:=Module[{a,k},If[i=1,a={{1,0},{0,-1}},a={{1,0},{0,1}}];
For[k=2,k≤n,k++,If[k==i,a=MatrixTensorProduct[a,{1,0},
{0,-1}]],a=MatrixTensorProduct[a,{1,0},{0,1}]]];a]

J=-1;
H=2J∑i=1n-1(1/4/σx[i].σx[i+1]+σy[i].σy[i+1]+σz[i].σz[i+1])-
1/4 IdentityMatrix[2n]);

β=1
ρunnormiert=Chop[MatrixExp[N[-βH]]];
→1
Traceρ=Sum[ρunnormiert[[i,i]],{i,1,2n}]
→11.5238
ρ=ρunnormiert/Traceρ;
RhoEigenvalues:=RhoEigenvalues=Eigenvalues[ρ]
SortedEigenvalues:=SortedEigenvalues=Reverse[Sort[RhoEigenvalues]]

δ:=0.1
(* Jetzt soll bestimmt werden, wieviele Eigenwerte man mindestens braucht, um in
der Summe (1-δ) zu überschreiten. *)
NumberAndSum:={1,SortedEigenvalues[[1]]}
NumberAndSum
→{1,0.0867768}
TakeTheNextOne[L_]:=L[[1]]+1,L[[2]]+SortedEigenvalues[[1+L[[1]]]]}
While[(NumberAndSum=TakeTheNextOne[NumberAndSum])[[2]]<
(1-δ),Print[NumberAndSum]]
NumberAndSum
→{2,0.173554}
→{3,0.26033}
→{4,0.347107}
→{5,0.433884}
→{6,0.520661}
→{7,0.579888}
→{8,0.639114}
→{9,0.698341}
→{10,0.757568}
→{11,0.795688}
→{12,0.833809}
→{13,0.855597}
→{14,0.877385}
→{15,0.899174}
→{16,0.920962}
(* die letzte Zeile gibt an, wieviele Eigenwerte man braucht (erste Zahl) und wie
die Summe lautet (zweite Zahl) *)
s:=Sum[-RhoEigenvalues[[j]]*Log[RhoEigenvalues[[j]]],{j,1,Length[RhoEigenvalues]}/n
Print["s=",s]
→s=0.581481
(* das hier oben ist die Entropiedichte der Eigenwerte der 2n x 2n-Dichtematrix *)

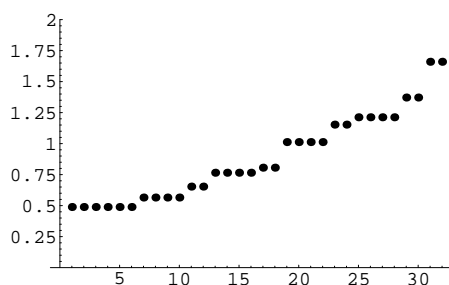
```

```
Print["QSM-Entropie=",N[Log[NumberAndSum[[1]]]/n]
→QSM-Entropie=0.554518
(* das hier ist die "Quanten-Shannon-McMillan-Entropie", d.h. der Log. der
Dimension des kleinsten Unterraums mit Maß  $\geq (1 - \delta)$  *)
```

```
p=N[1/n Log[Traceρ]];Print["p=",p]
→p=0.488883
(* das hier in der Zeile darüber ist die Näherung für die Pressure  $p(\beta)$  *)
```

```
u=(s-p)/β;Print["u=",u]
→u=0.0925979
(*und das hier ist eine Näherung für die innere Energie *)
```

```
ListPlot[-1/n Log[SortedEigenvalues],PlotStyle→PointSize[0.02],PlotRange→{0,2};
→
```



Anhang C

Notation

Symbol	Bedeutung	Definition
$\#X$ bzw. $ X $	Mächtigkeit der Menge X	—
$[\omega^h]$	innere Störung des Zustands ω	Abschnitt 3.3
$A \geq 0$, A Operator	A ist ein selbstadjungierter Operator mit nichtnegativen Eigenwerten	—
$A \geq B$, mit A, B Operatoren	A und B sind selbstadjungierte Operatoren mit $A - B \geq 0$	—
\mathcal{A}^∞	quasilokale Algebra	Gleichung (3.3)
$\mathcal{A}^{(n)}$	lokale Algebra auf $\Lambda(n)$	Abschnitt 3.1
$\mathfrak{B}^{(r)}$	Menge aller WW Φ mit $\ \Phi\ ^{(r)} < \infty$	Abschnitt 3.3
$\mathfrak{B}_1^{(r)}$	Menge aller eindimensionalen WW $\Phi \in \mathfrak{B}^{(r)}$ mit zusätzlicher Araki-Bedingung (3.11)	Abschnitt 3.3
$\partial_{ex} X$	Menge aller extremalen Punkte der konvexen Menge X	—
D_Ψ	Dichtematrix des Zustands Ψ	—
H_n bzw. H_Λ	lokaler Hamilton-Operator auf $\Lambda(n)$ bzw. Λ	Gleichung (3.6)
$\Lambda(n)$	im Eindimensionalen das Intervall $[1, \dots, n]$, in ν Dimensionen der Hyperwürfel $[1, \dots, n]^\nu$	Abschnitt 3.1
$\log X$	natürlicher Logarithmus $\log X = \ln X = \log_e X$ der Zahl $X \in \mathbb{R}^+$ oder des positiven Operators $X \geq 0$	—
$\Psi^{(n)}$	Blockzustand $\Psi^{(n)} = \Psi \upharpoonright \mathcal{A}^{(n)}$	Gleichung (3.4)
Ψ_n	lokaler Gibbs-Zustand bzgl. H_n	Gleichung (3.8)
$S(\mathcal{A})$	Menge aller Zustände auf \mathcal{A}	—
$S(\Psi)$	von Neumann-Entropie des Zustands Ψ gegeben durch $S(\Psi) = S(D_\Psi) = -\text{tr}(D_\Psi \log D_\Psi)$	Abschnitt 3.3
$S(\Psi, \phi)$	relative Entropie des Zustands Ψ bezüglich ϕ	Ende Abschnitt 3.3
$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	Pauli-Spin-Matrizen
$\mathcal{T}(\mathcal{A}^\infty)$	Menge aller translationsinvarianten Zustände auf der quasilokalen Algebra \mathcal{A}^∞	Gleichung (3.5)
T_δ^Ψ	δ -typischer Unterraum von Ψ	Definition 3.2.2
$\text{tr} X$	Spur der Matrix bzw. des Operators X	—

Literaturverzeichnis

- [1] H. Araki, *Gibbs States of a One Dimensional Quantum Lattice*, Commun. math. Phys. 14, 120 - 157 (1969)
- [2] H. Araki, *On the equivalence of the KMS condition and the variational principle for quantum lattice systems*, Comm. Math. Phys. 38, 1 - 10 (1974)
- [3] I. Bjelaković, T. Krüger, R. Siegmund-Schultze, A. Szkoła, *The Shannon-McMillan theorem for ergodic quantum lattice systems*, Invent. math. 155, 203 - 222 (2004)
- [4] I. Bjelaković, T. Krüger, R. Siegmund-Schultze, A. Szkoła, *Chained Typical Subspaces - a Quantum Version of Breiman's Theorem*, Preprint quant-ph/031177 (2003)
- [5] O. Bratteli, D. W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II*, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, 1981
- [6] T. M. Cover, J. A. Thomas, *Elements of Information Theory*, Wiley Series in Telecommunications, 1991
- [7] Z. N. C. Ha, *Quantum Many-Body Systems in One Dimension*, World Scientific Publishing, Singapore 1996
- [8] F. Hiai, D. Petz, *Entropy Densities for Gibbs States of Quantum Spin Systems*, Rev. Math. Phys. Vol. 5 No. 4, 693 - 712 (1993)
- [9] A.G. Izergin, V.S. Kapitonov, N.A. Kitanine, *Equal-time temperature correlators of the one-dimensional Heisenberg XY chain*, Preprint solv-int/9710028 (1997)
- [10] B. Nachtergaele, S. Starr, *A Ferromagnetic Lieb-Mattis Theorem*, Preprint math-ph/0408020 (2004)
- [11] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, Cambridge 2000
- [12] D. Petz, *Monotonicity of quantum relative entropy revisited*, Rev. Math. Phys. 15, 79 - 91 (2003)
- [13] D. Ruelle, *Statistical Mechanics*, W.A. Benjamin, New York 1969
- [14] R. Seiler, A. Knauf, *Mathematische Physik II: Statistische Mechanik*, Vorlesungsskript, TU Berlin und FAU Erlangen-Nürnberg, 2001
- [15] P.C. Shields, *The Ergodic Theory of Discrete Sample Paths*, American Mathematical Society 1996
- [16] B. Simon, *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*, Princeton University Press, Princeton, 1993

Erklärung

Die selbstständige und eigenhändige Anfertigung
versichere ich an Eides statt.

Datum / Unterschrift