

# Phasenübergang des Zwei-Spin-Boson Modells

## Phase transition of two dissipative spins

Bachelorarbeit  
an der Fakultät für Physik  
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von  
Thorsten Joachim Werner  
aus München

Gutachter: Prof. Dr. Jan von Delft



München, den 11. Juni 2013



## Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2. Quanten-Phasenübergang</b>	<b>6</b>
<b>3. Spin-Boson-Modell</b>	<b>8</b>
<b>4. Numerisches Verfahren</b>	<b>10</b>
<b>5. Zwei-Spin-Boson Modell</b>	<b>13</b>
5.1. Phasengrenze . . . . .	14
5.1.1. Berechnungen . . . . .	14
5.1.2. Numerische Bestimmung . . . . .	14
5.2. Verschränkungsentropie . . . . .	16
5.3. Kritische Exponenten . . . . .	17
<b>6. Zusammenfassung</b>	<b>19</b>
<b>A. Diagramme zu kritischen Exponenten</b>	<b>20</b>
<b>B. Programmteile</b>	<b>24</b>
B.1. Phasengrenze . . . . .	24
B.2. Verschränkungsentropie . . . . .	26

## 1. Einleitung

Jedes reale Quantensystem steht mehr oder weniger mit seiner Umgebung in Wechselwirkung. Diese Systeme werden als offene Quantensysteme bezeichnet und spielen in der Physik eine wichtige Rolle, da sie vielfältig anwendbar sind. So sind sie zum Beispiel hilfreich in der Quantenoptik, der Quanteninformationstheorie oder in der Quanten-Statistischen-Mechanik [6]. Das Spin-Boson-Modell ist ein einfaches und viel untersuchtes Beispiel für ein theoretisches Modell eines offenen Quantensystems. Man kann es z.B. heranziehen um das Verhalten eines qbits, das mit der Umwelt wechselwirkt, zu beschreiben [10]. Das Modell beschreibt ein Zweizustandssystem, das mit einem Bad wechselwirkt und unter Einfluss eines äußeren magnetisches Feld steht. Dieses System besitzt einen Quanten-Phasenübergang bei  $T = 0K$ . Hierbei gibt es eine delokalisierte Phase, in der die Magnetisierung  $\langle \sigma_x \rangle = 0$  ist, und eine lokalisierte Phase, in der gilt  $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$ . Die Phase hängt dabei von der Stärke der Spin-Bad-Kopplung und dem Energieunterschied zwischen den zwei Spin-Zuständen ab. Der Phasenübergang wird durch verschiedene kritische Exponenten charakterisiert. Aus quantum-to-classical correspondence (QCC) Überlegungen, lassen sich Vorhersagen für die kritischen Exponenten treffen. Diese versuchte man mit NRG, einem numerischen Verfahren, zu bestätigen. Die Ergebnisse von NRG konnten die Vorhersagen allerdings nicht bestätigen und es wurde daraus geschlossen, dass die QCC hier zusammenbricht [3]. Bei späteren Untersuchungen mit anderen numerischen Verfahren, wie Monte Carlo Simulationen [16] oder VMPS [4], konnten die Ergebnisse von NRG nicht bestätigt werden. Es konnten statt dessen die Vorhersagen der QCC bestätigt werden.

In dieser Arbeit wollen wir nun ein sehr ähnliches System untersuchen, das aus zwei Spins besteht, die mit einem gemeinsamen Bad wechselwirken und miteinander in Wechselwirkung stehen, wir werden es im Folgenden Zwei-Spin-Boson Modell nennen. Auch dieses System hat einen Quanten-Phasenübergang bei  $T = 0K$ , analog zum Spin-Boson-Modell. Für dieses System erwarten wir die gleichen kritischen Exponenten wie beim Spin-Boson-Modell [10].

Wir werden in dieser Arbeit das Zwei-Spin-Boson Modell mit der von Guo et.al [4]. entwickelten VMPS Methode untersuchen. Dabei wird der Hamiltonian zuerst auf eine Kette übergeführt. So kann man dann durch numerische Variation, den Grundzustand finden, also den Zustand in dem der Erwartungswert des Hamiltonian minimal ist. Aus diesem Grundzustand können dann viele andere Größen berechnet werden.

Die Arbeit wird folgendermaßen aufgebaut: Im ersten Teil werden wir einige theoretische Grundlagen von Quanten-Phasenübergängen beschreiben. Anschließend werden wir im zweiten Abschnitt in das Spin-Boson-Modell einführen und kurz auf die Kontroverse um den Phasenübergang eingehen. Die numerische Methode VMPS werden wir im dritten Abschnitt kurz beschreiben. In den folgenden Kapiteln beschäftigen wir uns dann mit dem Zwei-Spin-Boson Modell und seinem Phasenübergang. Dabei werden erst die Grundlagen des Systems beschrieben. Die Resultate werden dann ab Abschnitt 5.1 vorgestellt. Wir beginnen dabei mit dem Verlauf der Phasengrenze und stellen dann

unsere Ergebnisse der Verschränkungsentropie vor. Im letzten Teil werden noch einige kritische Exponenten des Phasenübergangs bestimmt. Diese werden mit theoretischen Erwartungen und mit Ergebnissen, die mit NRG gewonnen wurden, verglichen.

## 2. Quanten-Phasenübergang

In diesem Abschnitt werden wir die Grundlagen von Quanten-Phasenübergängen behandeln. Die Informationen für diesen Abschnitt stammen aus [14], das auch für ausführlichere Informationen zu empfehlen ist.

Phasenübergänge erkennt man daran, dass sich Eigenschaften des Systems qualitativ ändern unter Variation eines Parameters. Dabei unterscheidet man zwischen kontinuierlichen Phasenübergängen und Phasenübergängen erster Ordnung. Bei Phasenübergängen erster Ordnung können beide Phasen gleichzeitig am kritischen Punkt existieren. Dies ist bei kontinuierlichen Phasenübergängen nicht möglich. Für kontinuierliche Phasenübergänge kann man meistens einen sogenannten Ordnungsparameter finden, der in der ungeordneten Phase null ist aber in der anderen Phase, der geordneten, sich von null unterscheidet. Beispielsweise ist in Eisen die Magnetisierung  $M = 0$  für  $T > 770^\circ\text{C}$  und es gilt  $M \neq 0$  für  $T < 770^\circ\text{C}$ . Man kann Phasenübergänge unterscheiden, die bei Temperaturen  $T > 0\text{K}$  und bei  $T = 0\text{K}$  stattfinden. Für  $T > 0$  wird das Verhalten des Systems durch einen Wettstreit zwischen thermischen Fluktuationen und Quantenfluktuationen bestimmt. Man kann zeigen, dass in der Nähe der Phasengrenze immer die thermischen Fluktuationen überwiegend das System beeinflussen, so dass hier klassisch gerechnet werden kann [14]. Im Fall  $T = 0\text{K}$  muss hingegen immer quantenmechanisch gerechnet werden, da es hier keine thermischen Fluktuationen gibt. Deshalb werden Phasenübergänge bei  $T = 0\text{K}$  auch Quanten-Phasenübergänge genannt. In der Realität ist der Fall  $T = 0\text{K}$  nicht zugänglich. Dennoch ist die Untersuchung solcher Systeme von Bedeutung, da die Existenz solcher kritischen Punkte wichtig für das Verständnis von z.B. Hochtemperatur-Supraleitern oder zweidimensionalen Elektronengasen ist [14]. Man kann nämlich aus dem Fall  $T = 0\text{K}$  Rückschlüsse auf das Verhalten bei positiven Temperaturen ziehen.

Mathematisch lassen sich Phasenübergänge durch ihre kritischen Exponenten charakterisieren. Diese beschreiben das Verhalten oder die Entartung verschiedener physikalischer Größen in der Nähe des Phasenübergangs. So lassen sich für den oben erwähnten Phasenübergang von Eisen beispielsweise folgende kritischen Exponenten definieren:

	Exponent	Definition	Bedingungen
spezifische Wärme	$\alpha$	$C \propto  t ^{-\alpha}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
Ordnungsparameter	$\beta$	$m \propto (-t)^{-\beta}$	$t \rightarrow 0(t < 0), B = 0$
Suszeptibilität	$\gamma$	$\chi \propto  t ^{-\gamma}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
Korrelationslänge	$\nu$	$\xi \propto  t ^{-\nu}$	$t \rightarrow 0, B = 0$

Besonders interessant ist dabei der Exponent  $\nu$ . In der ungeordneten Phase ist zwar der Erwartungswert des Ordnungsparameters gleich null, aber es gibt Fluktuationen um diesen. Nähert sich das System der Phasengrenze, korrelieren diese Fluktuationen auf immer größeren Längen. Man kann so in der Nähe des Phasenübergangs die Korrelati-

onslänge  $\xi$  als eine Längenskala definieren. Es ergibt sich, dass diese sich verhält wie

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (1)$$

wobei  $t$  ein dimensionsloses Maß für die Entfernung vom kritischen Punkt ist und  $\nu$  eine den Phasenübergang charakterisierende Konstante.

Aus theoretischen Überlegungen, wie zum Beispiel der Landau-Theorie oder der „quantum-to-classical correspondence“ können dann Zusammenhänge zwischen verschiedenen kritischen Exponenten hergestellt werden und auch teilweise Vorhersagen getroffen werden.

### 3. Spin-Boson-Modell

Das Spin-Boson-Modell beschreibt ein Spin 1/2 System, das mit einem bosonischen Bad wechselwirkt, welches durch harmonische Oszillatoren beschrieben wird. Es wurde ursprünglich 1978 von Legget [7] im Zusammenhang mit der Untersuchung von dissipativen Quantensystemen eingeführt [14]. Dieses Modell ist in der Physik zum Beispiel für die Beschreibung eines nicht perfekt von der Umgebung isolierten qbits [8], das Verhalten von Biomolekülen [9] oder bei der Untersuchung von gefangenen Ionen [11] von Bedeutung. Das Spin-Boson-Modell hat einen Quanten-Phasenübergang bei  $T = 0K$ .

Die Hamilton-Funktion dieses Systems ist gegeben durch:

$$H_{SBM} = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\epsilon}{2}\sigma_z + \sum_q \omega_q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \sum_q \lambda_q \frac{\sigma_x}{2} (\hat{a}_q^\dagger + \hat{a}_q). \quad (2)$$

Hierbei beschreibt der erste Term das Zweizustandssystem. Der zweite Term gehört zum Bad, welches aus harmonischen Oszillatoren besteht, und der dritte Term charakterisiert die Wechselwirkung zwischen dem Spin-System und dem Bad. Hier und in allen folgenden Gleichungen wird die Planck-Konstante  $\hbar = 1$  gesetzt. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der bosonischen Badmoden sind gegeben durch  $\hat{a}_q$  und  $\hat{a}_q^\dagger$ . Ein transversales Magnetfeld wird durch  $\epsilon$  beschrieben,  $\Delta$  charakterisiert den Energieunterschied zwischen den zwei Spin Zuständen,  $\sigma_x$  und  $\sigma_z$  sind die Pauli Matrizen. Die Stärke der Kopplung zwischen Bad und Spin wird durch die  $\lambda_i$  beschrieben, und  $\omega_i$  sind die Frequenzen der harmonischen Oszillatoren, aus denen das Bad besteht. Der Einfluss des Bades wird vollständig durch die Spektralfunktion  $J(\omega)$  beschrieben, mit

$$J(\omega) = \pi \sum_q \lambda_q^2 \delta(\omega - \omega_q). \quad (3)$$

Da wir den Phasenübergang bei  $T = 0K$  untersuchen wollen, sind für uns vor allem die Moden mit niedriger Energie von Interesse. Deshalb wählen wir für die Spektralfunktion einen power-law Ansatz, der nur Frequenzen bis zu einer oberen Frequenz  $\omega_c$  beachtet

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\omega^s\omega_c^{1-s}\Theta(\omega_c - \omega)\Theta(\omega). \quad (4)$$

Man kann  $\alpha$  als einen die Kopplungsstärke beschreibenden Parameter interpretieren und  $s$  als einen die Dissipation beschreibenden Parameter. Hierbei wird der Fall  $s = 1$  als ohmscher Fall und  $s < 1$  als sub-ohmscher Fall bezeichnet.

Dieses System hat für  $T = 0K$  einen Quanten-Phasenübergang für  $0 \leq s \leq 1$ . Ist kein äußeres Feld angelegt, werden die Eigenschaften des Systems nur durch die Kopplung mit dem Bad und durch  $\Delta$  festgelegt. Dabei ergeben sich zwei verschiedene Phasen, eine lokalisierte Phase, in der die Kopplung an das Bad stark genug ist um eine Magnetisierung von  $\langle \sigma_x \rangle \neq 0$  hervorzurufen. Ist die Kopplung nicht stark genug, ergibt sich eine Magnetisierung von  $\langle \sigma_x \rangle = 0$ , dies nennt man die delokalisierte Phase. Den Verlauf der Phasengrenze kann man Abbildung 1 entnehmen.



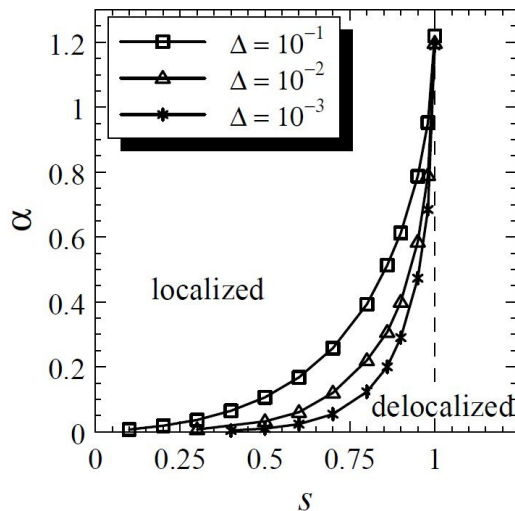


Abbildung 1: Phasengrenze für das Spin-Boson-Modell für  $\epsilon = 0$  und verschiedene Werte von  $\Delta$ . Abbildung aus [3]

Im Spin-Boson-Modell werden unter anderem folgende kritische Exponenten definiert [4]:

$$\langle \sigma_x \rangle \propto |\alpha - \alpha_c|^{-\beta} \quad \langle \sigma_x \rangle \propto |h_x|^{1/\delta} \quad (5)$$

Für diese kann man aus theoretischen Überlegungen folgende Vorhersagen machen [15]:

- für  $0.5 < s < 1$  ergeben sich aus feldtheoretischen Berechnungen folgende sogenannte Hyperscaling Gleichungen

$$\delta = \frac{1+s}{1-s} \quad 2\beta = \nu(1-s) \quad (6)$$

- für  $0 < s < 0.5$  erwartet man Mean-Field Ergebnisse

$$\delta = 3 \quad \beta = \frac{1}{2} \quad (7)$$

Aus der quantum-to-classical correspondence (QCC) ergibt sich, dass sich der Phasenübergang analog zum klassischen Phasenübergang einer 1D Ising Kette mit langreichweitiger Wechselwirkung verhalten sollte [5]. Numerische Untersuchungen mit NRG konnten die Mean-Field Vorhersage allerdings nicht bestätigen, weshalb die theoretischen Vorhersagen durch QCC in Frage gestellt wurden [3]. Die Ergebnisse von NRG legten nahe, dass für  $0 < s < 1$  die Hyperscaling Vorhersagen gelten sollten [3]. Es zeigte sich allerdings, dass Ergebnisse anderer numerischer Verfahren, wie zum Beispiel das auch für diese Arbeit verwendete VMPS Verfahren oder exakte Diagonalisierung, die Ergebnisse von NRG nicht bestätigten, sondern mit den theoretischen Erwartungen übereinstimmen [4] [1].

## 4. Numerisches Verfahren

In dieser Arbeit wollen wir das modifizierte Spin-Boson-Modell untersuchen, das in Abschnitt 5 beschrieben wird. Die kritischen Eigenschaften des Modells wurden für  $s > 0.5$  mit NRG untersucht [10]. Das NRG Verfahren ist jedoch aufgrund der Bosonischen Basis nicht geeignet für Untersuchungen im Bereich  $s < 0.5$  [4]. Für das normale Spin-Boson-Modell wurde von Guo in [4] eine Kombination aus NRG und DMRG entwickelt, die die numerischen Probleme von NRG behebt und so eine Berechnung möglich macht. Dieses Verfahren soll nun auch auf das in dieser Arbeit behandelte Modell angewendet werden. In diesem Abschnitt möchte ich einen Überblick über die Grundlagen dieses Verfahrens geben. Für eine ausführlichere Darstellung siehe [4].

Anfangs geht man analog zum NRG-Verfahren vor, indem man die Spektralfunktion diskretisiert und den Hamiltonian des Systems auf eine so genannte Wilson-Kette überführt. Zum Diskretisieren unterteilt man  $J(\omega)$  in Intervalle  $[\omega_{m+1}, \omega_m]$  mit  $\omega_0 = \omega_c$  und  $\lim_{m \rightarrow \infty} \omega_m = 0$ . Da wir vor allem an niedrigen Energieskalen interessiert sind, ist eine logarithmische Diskretisierung von Vorteil. Also wählen wir  $\omega_0 = \omega_c$  und  $\omega_m = \omega_c \Lambda^{1-m-z}$ .

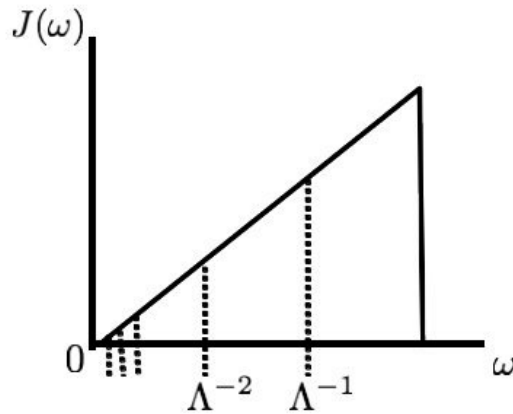


Abbildung 2: Spektralfunktion für  $s=1$  mit logarithmischer Diskretisierung

Um den Hamiltonian Gl.(2) numerisch zugänglich zu machen, ist es nötig den Hamiltonian in zwei Teile aufzuteilen. Der erste Teil ist exakt lösbar und ergibt sich zu

$$H_{loc} = -\frac{\Delta}{2}\sigma^x - \frac{\epsilon}{2}\sigma^z. \quad (8)$$

Hierin sind  $\Delta$ ,  $\epsilon$ ,  $\sigma^x$  und  $\sigma^z$  wie in Abschnitt 3 definiert. Der zweite Teil lautet

$$H_2 = \frac{\sigma^z}{2} \sum_{k>0} \lambda_k (a_k^\dagger + a_k) + \sum_{k>0} \omega_k a_k^\dagger a_k, \quad (9)$$

dieser muss noch numerisch zugänglich gemacht werden. Diskretisiert man die Spektralfunktion logarithmisch, ergibt sich für den Hamiltonian folgende Form [2]

$$H_{diskret} = H_{loc} + \sum_n \xi_n a_n^\dagger a_n + \frac{\sigma^x}{2\sqrt{\pi}} \sum_n \gamma_n (a_n^\dagger + a_n), \quad (10)$$

wobei  $\gamma_n$  und  $\xi_n$  definiert sind als [2]:

$$\gamma_n^2 = \int_{\Lambda^{-n}}^{\Lambda^{-(n+1)}} J(\omega) d\omega = \frac{2\pi\alpha}{s+1} (1 - \Lambda^{-(s+1)}) \Lambda^{-n(s+1)} \quad (11)$$

$$\xi_n = \gamma_n^{-2} \int_{\Lambda^{-n}}^{\Lambda^{-(n+1)}} J(\omega) d\omega = \frac{s+1}{s+2} \frac{1 - \Lambda^{-(s+2)}}{1 - \Lambda^{-(s+1)}} \Lambda^{-n} \quad (12)$$

Hierin charakterisieren die  $\gamma_n$  die Kopplung zwischen dem Bad und dem Zweizustandssystem und  $\xi_n$  legt die Energien der Badmoden fest. Diesen Hamiltonian kann man nun auf eine semi-infinite Kette mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung, eine sogenannte Willson Chain, transformiert. Für die ausführlichen Details sei auf [2] verwiesen. Der Hamiltonian lautet nun:

$$H_{WC} = H_{loc} + \sum [\epsilon_n b_n^\dagger b_n + t_n (b_n^\dagger b_{n+1} + b_{n+1} b_n)] + \sqrt{\frac{\eta_0}{2\pi}} (\sigma_1^z + \sigma_2^z) (b_0 + b_0^\dagger) \quad (13)$$

wobei  $b_n^\dagger$  und  $b_n$  die bosonischen Erzeuger und Vernichter sind, die durch unitäre Transformation aus den  $a_n^\dagger$  und  $a_n$  hervorgehen. Die gesamte Wechselwirkung zwischen dem Modell und dem Bad wird nun durch  $\eta_0 = \int J(\omega) d\omega$  beschrieben. Das bosonische Bad wird also ab dem ersten Kettenglied beschrieben, wobei  $t_n$  die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zwischen Platz  $n$  und  $n+1$  beschreibt und  $\epsilon_n$  die Eigenenergie des Kettenplatzes. Diese werden numerisch im Programm bestimmt.

Da das behandelte Modell ein bosonisches Bad umfasst, kann jeder Kettenplatz unendlich viele Bosonischezustände beinhalten, was zu einem unendlich großen Hilbertraum führt. Die bosonischen NRG Verfahren haben hier Probleme, da sie in zu kleinen Hilberträumen rechnen. Darum benutzen wir im Folgenden ein auf DMRG basierendes Verfahren, welches das Problem der unendlich großen bosonischen Basis umgeht.

Wie in [12] [13] beschrieben, kann man einen Quantenzustand als ein Produkt von Matrizen schreiben, der sogenannten Matrix Produkt Form (MPS).

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{N-1}} A^{\sigma_N} |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle \quad (14)$$

wobei  $|\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle$  die Basiselemente sind. Wie in [12] beschrieben kann man Zustände dieser Art und Operationen darauf in einer übersichtlichen graphischen Form darstellen. So wird der Zustand  $|\Psi\rangle$  von oben wie in Abbildung 3 dargestellt. Die Quadrate repräsentieren dabei die Matrizen zugehörig zur entsprechenden Kettenposition, die Linien nach oben die physikalischen Indizes und die horizontalen Linien sogenannte Hilfsindizes oder auch das Produkt zwischen den Matrizen.

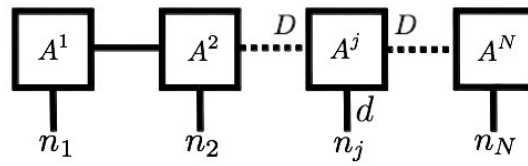


Abbildung 3: Matrix Produkt Zustand

Anstatt wie in NRG den Hamiltonian interaktiv zu lösen, benutzen wir ein Variationsverfahren, welches auf der DMRG Methode basiert [12]. Die Wellenfunktion des Systems kann in MPS-Form geschrieben werden:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{n_j, \sigma\}} A^0[\sigma] A^1[n_1] A^2[n_2] \dots A^{N-1}[n_{N-1}] A^N[n_N] |\sigma, n_1, n_2, \dots, n_N\rangle. \quad (15)$$

Zu Beginn werden die Einträge der Matrizen zufällig ausgewählt. Um den Grundzustand zu bestimmen, muss folgende Bedingung durch Variation erfüllt werden:

$$\partial_{A^j} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0. \quad (16)$$

Man optimiert eine Matrix nach der anderen mit der obigen Bedingung und geht so lange in der Kette hin und her bis die Eigenenergien konvergiert sind, sich also nur noch in Rahmen der Maschinengenauigkeit ändern.

Wie oben beschrieben muss der theoretisch eigentlich unendlich-dimensionale Hilbertraum auf jedem Kettenplatz auf eine endliche Dimension reduziert werden, um ihn numerisch zugänglich zu machen. Die optimale lokale Basis, welche eine korrekte Beschreibung des Grundzustands garantiert, muss je nach Position im Phasendiagramm unterschiedlich gewählt werden. VMPS benutzt daher eine variationelle Bestimmung der optimalen Basis, um so die korrekte Beschreibung des Grundzustandes sicherzustellen.

## 5. Zwei-Spin-Boson Modell

In dieser Arbeit untersuchen wir das kritische Verhalten des Grundzustandes einer modifizierten Variante des Spin-Boson Modells. Dabei betrachten wir zwei Spins, welche an ein gemeinsames Bad koppeln und miteinander in Wechselwirkung stehen. Der dazugehörige Hamiltonian lautet daher [10]:

$$H_{ZSBM} = \sum_{j=1}^2 \left[ \frac{\Delta_j}{2} \sigma_j^x + \frac{\epsilon_j}{2} \sigma_j^z + \frac{\sigma_j^z}{2} \sum_{k>0} \lambda_k (b_k^\dagger + b_k) \right] + \frac{K}{4} \sigma_1^z \sigma_2^z + \sum_{k>0} \omega_k b_k^\dagger b_k. \quad (17)$$

Dabei beschreibt der Teil in großen eckigen Klammern die Spins und ihre Wechselwirkung mit dem Bad. Die Spin-Spin Wechselwirkung wird durch einen Heisenberg-Term mit Kopplungsstärke  $K$  beschrieben. Das Bad wird im letzten Term beschrieben. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der bosonischen Badmoden sind gegeben durch  $b_k$  und  $b_k^\dagger$ . Ein transversales Magnetfeld wird durch die  $\epsilon_j$  beschrieben, die  $\Delta_j$  charakterisieren die Energieunterschiede zwischen den zwei Spin Zuständen,  $\sigma^x$  und  $\sigma^z$  sind die Pauli Matrizen. Die Stärke der Kopplung zwischen Bad und Spin wird durch die  $\lambda_k$  beschrieben, und  $\omega_k$  sind die Frequenzen der harmonischen Oszillatoren, aus denen das Bad besteht. Der Einfluss des Bades wird außerdem vollständig durch die Spektralfunktion  $J(\omega)$  beschrieben mit

$$J(\omega) = \pi \sum_k \lambda_k^2 \delta(\omega - \omega_k). \quad (18)$$

Für diese Funktion wird analog zum Spin-Boson Modell ein power-law Ansatz gewählt, da wir auch hier vor allem an den Moden mit niedriger Energie Interesse haben.

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\omega^s\omega_c^{1-s}\Theta(\omega_c - \omega)\Theta(\omega). \quad (19)$$

Hierbei ist  $\omega_c$  die maximale Frequenz, die noch beachtet wird. Der Parameter  $\alpha$  kann als die Kopplungsstärke zwischen Spins und Bad interpretiert werden,  $s$  beschreibt die Dissipation im System. Hierbei wird der Fall  $s = 1$  als ohmscher Fall und  $s < 1$  als sub-ohmscher Fall bezeichnet.

Von Bedeutung ist dieses System, da es z.B. ein zwei-qbit System beschreibt, also ein CNOT Gatter [10]. Dieses könnte für Quantencomputer benutzt werden. Des Weiteren ist es möglich, den Wettbewerb zwischen der Spin-Spin Wechselwirkung und der Spin-Bad Wechselwirkung zu untersuchen [10].

Wir erwarten auch hier einen Phasenübergang der sehr ähnlich zu dem im Spin-Boson-Modell ist (siehe Abschnitt 3). Hier ist das Verhalten des Systems neben der Spin-Bad-Wechselwirkung und  $\Delta$  noch zusätzlich durch die Kopplung  $K$  der beiden Spins bestimmt. Es sollte auch hier eine lokalisierte Phase existieren, in der die Kopplung zwischen Bad und den Spins stark genug ist, so dass sich eine Magnetisierung von  $\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \neq 0$  ergibt. Genauso sollte eine delokalisierte Phase existieren, in der gilt  $\langle \sigma_{1,2}^z \rangle = 0$ . Es ist zu erwarten, dass die Phasengrenze auch von  $K$  abhängt.

Im Folgenden behandeln wir dieses Modell mit dem VMPS-Ansatz aus [4], der uns ermöglicht, das kritische Verhalten im gesamten sub-ohmschen Spektrum  $0 < s < 1$  zu analysieren. Alle in den folgenden Abschnitten beschriebenen Rechnungen wurden mit einer Kettenlänge von  $L = 50$  oder  $L = 80$  (nur für  $s = 0.9$ ) und einem  $\Lambda = 2$  durchgeführt. Bei allen Berechnungen wurden für beide Spins die Amplituden gleich gewählt, also  $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$  und  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$ , des Weiteren wurde  $\omega_c = 1$  gesetzt.

## 5.1. Phasengrenze

In diesem Abschnitt diskutieren wir die mit der VMPS-Methode gewonnenen Phasendiagramme zu dem System Gl.(17). Da diese auch von Orth für  $s = 0.5$  und  $s = 1$  berechnet wurden, werden wir unsere Ergebnisse mit diesen vergleichen. Außerdem haben wir auch für  $s = 0.3$  das Diagramm berechnet.

Für diesen Phasenübergang ergibt sich, dass es sinnvoll ist, die Magnetisierung  $\langle \sigma_{1,2}^z \rangle$  als Ordnungsparameter zu benutzen. Dabei gilt  $\langle \sigma_{1,2}^z \rangle = 0$  in der delokalisierten Phase und  $\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \neq 0$  in der lokalisierten Phase.

### 5.1.1. Berechnungen

Die Phasengrenze wurde für negative und positive Werte von  $K$ , für  $s = \{0.3, 0.5, 1\}$  und für Amplituden  $\Delta = \{0.01, 0.05, 0.1\}$  bestimmt. Bei  $s = 1$  konnte die Phasengrenze für  $\Delta = 0.01$  leider aus numerischen Gründen nicht bestimmt werden. Die Ergebnisse kann man Abbildung 4 entnehmen.

Wie man erkennen kann, lokalisiert das Modell für negative Werte von  $K$  leichter als für  $K > 0$  und die Phasengrenze ist nur schwach von  $K$  abhängig. Für  $K > 0$  steigt die Phasengrenze und geht in einen linearen Anstieg über. Dieses Verhalten war zu erwarten, da für  $K < 0$  und  $\Delta = \epsilon = 0$  die Zustände mit niedrigster Energie die sind, in denen die Spins gleich gerichtet sind.

Bei  $K > 0$  und  $\Delta = \epsilon = 0$  ist es energetisch günstiger, wenn sich die Spins entgegengesetzt orientieren. Es ist zudem zu beobachten, dass sich die Phasengrenze zu kleineren Werten von  $\alpha_c$  verschiebt, wenn  $s$  und  $\Delta$  abnehmen (analog zum Spin-Boson-Modell). Dieses Verhalten ist zu erwarten, da mit größerem  $\Delta$  der Energieaufwand zum Umkehren eines Spins größer ist und es für kleinere  $s$  mehr Oszillatoren mit kleiner Frequenz gibt.

Vergleicht man die Ergebnisse für  $s = 0.5$  und  $s = 1$  mit den Ergebnissen von [10], so kann man eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den beiden Methoden feststellen.

### 5.1.2. Numerische Bestimmung

Zur Bestimmung der Phasengrenze wurden die bosonischen Besetzungszahlen auf der Kette herangezogen. Dies ist in den Abbildung 5a bis 5b illustriert: in 5a befindet sich das System in einem delokalisierten Zustand charakterisiert durch stark abfallende Besetzungszahl vor Ende der Kette. In 5b befindet man sich in der Nähe der Phasengrenze, ist aber noch delokalisiert. In Abbildung 5c ist dann auf den letzten Plätzen ein Anstieg zu erkennen. Man befindet sich hier in der lokalisierten Phase. Zur exakten Lokalisierung

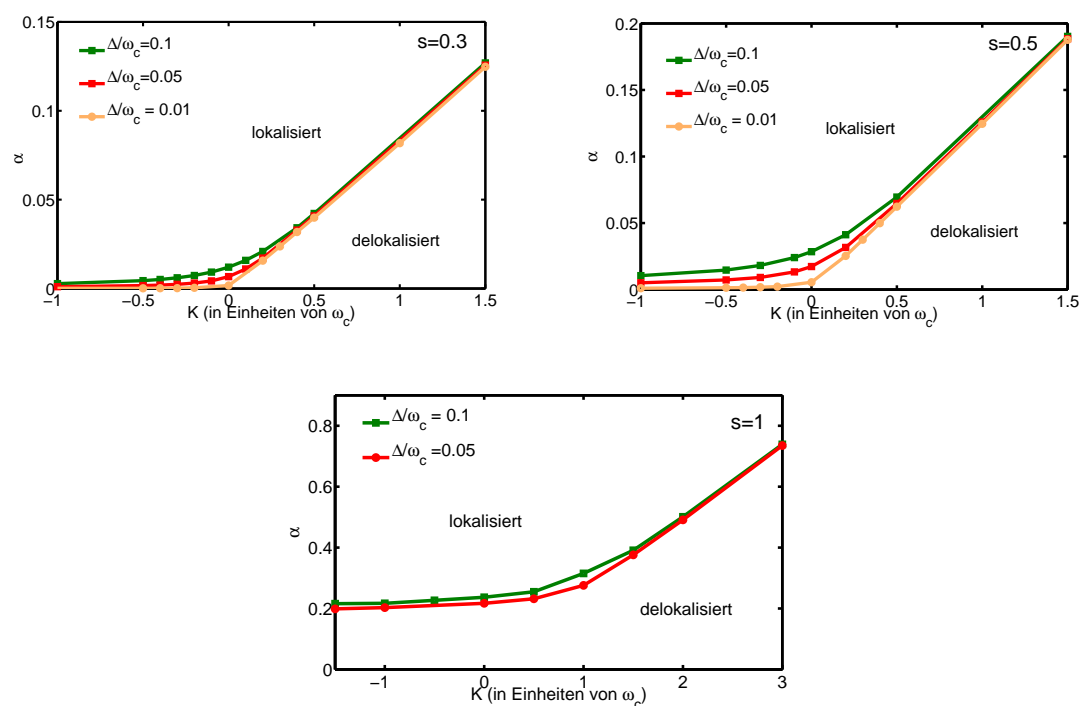


Abbildung 4: Phasengrenze für  $s=0.3, 0.5, 1$  in Abhängigkeit der Spin-Bad Kopplungsstärke  $\alpha$  und der Spin-Spin Kopplung  $K$ . Gewonnen mit VMPS mit  $D = 40, d_{opt} = 16, L = 50$

der Phasengrenze variieren wir  $\alpha$  bis sich die Besetzungszahl in einem Zustand ähnlich Abbildung 5b befindet. Dieser kritische Wert der Kopplungsstärke wird im Folgenden als  $\alpha_c$  bezeichnet. So konnte  $\alpha_c$  für  $s < 1$  mit einer Genauigkeit von ca.  $10^{-7}$  bestimmt werden. Die Details zur numerischen Bestimmung können dem Anhang B.1. entnommen werden.

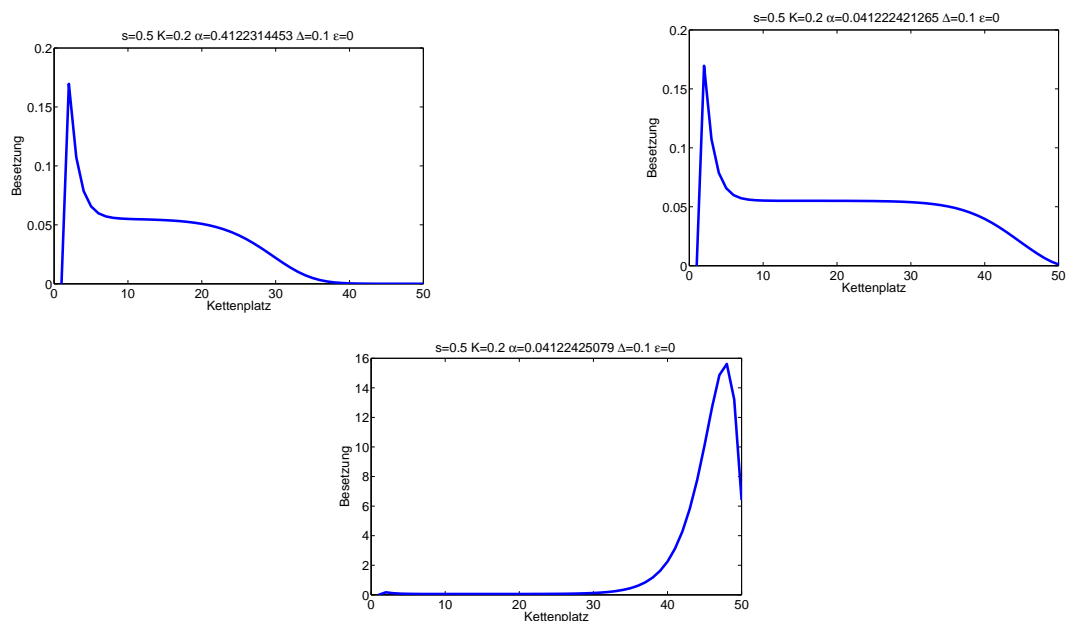


Abbildung 5: Besetzungszahlen der Kette für verschiedene  $\alpha$ . In a) delokalisiert in b) nahe der Phasengrenze und in c) lokalisiert.

## 5.2. Verschränkungsentropie

Da auch im Artikel von Orth [10] die Verschränkungsentropie mit NRG berechnet wurde, haben wir diese auch mit der VMPS Methode berechnet. Im Folgenden werden wir die Ergebnisse vorstellen und mit denen von Orth vergleichen.

Die Verschränkungsentropie  $S$  ist definiert als

$$S = -Tr[\rho_S \log_2 \rho_S], \quad (20)$$

wobei  $\rho_S = Tr_B \rho$  definiert wurde, und die reduzierte Dichtematrix der beiden Spins beschreibt. Mit  $Tr_B$  wird die Spur über die Freiheitsgrade des Bades bezeichnet und  $\rho$  ist die Dichtematrix des gesamten Systems. Dabei gilt, dass  $0 \leq S \leq 2$ , wobei  $S = 0$  bedeutet, dass Spin und Bad nicht miteinander verschränkt sind [10].

Die mit VMPS gewonnenen Ergebnisse kann man der Abbildung 6 entnehmen.

Dabei ist zu beobachten, dass im ohmschen Bereich für  $-0.5 \leq K/\omega_c \leq 0.5$  die Verschränkungsentropie nur in der delokalisierten Phase von null verschieden ist, und an der Phasengrenze schnell auf null abfällt. Anders für große  $K$  im ohmschen Bereich und für den sub-ohmschen Bereich. Hier unterscheidet sich  $S$  nur in der Umgebung der Phasengrenze von null.

Die oben präsentierten Ergebnisse stimmen mit denen von Orth [10] gut überein. Nur für große  $K$  Werte im ohmschen Fall und teilweise auch im sub-ohmschen Fall unterscheiden sich die Höhen der Peaks, was man aber wahrscheinlich durch mehr Berechnungen in der Umgebung der Anstiege beheben könnte. Die Details zur numerischen Bestimmung können dem Anhang B.2. entnommen werden.



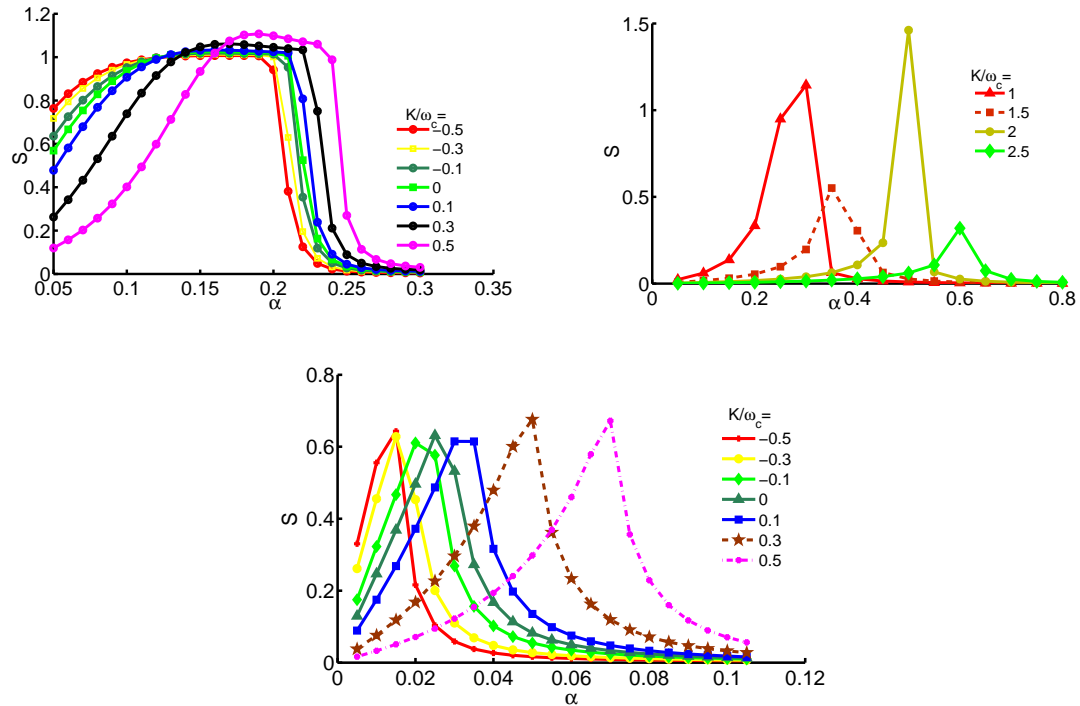


Abbildung 6: Verschränkungsentropie  $S$  als Funktion von  $\alpha$ . In a) für  $s=1$  und  $-0.5 \leq K \leq 0.5$ , in b) für  $s=1$  und  $1 \leq K \leq 2.5$  und in c) für  $s=0.5$  und  $-0.5 \leq K \leq 0.5$

### 5.3. Kritische Exponenten

Im Folgenden untersuchen wir das kritische Verhalten des Modells, welches starke Parallelen zum normalen Spin-Boson-Modell aufweist. Dabei werden theoretische Erkenntnisse aus [10] herangezogen.

Für Exponenten, die folgendermaßen definiert sind

$$\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \sim |\Delta - \Delta_c|^{\beta_1} \quad (21)$$

$$\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \sim |\epsilon_{1,2}|^{1/\delta} \quad (22)$$

$$\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \sim |K - K_c|^\zeta, \quad (23)$$

ergeben sich Vorhersagen im Bereich  $0.5 \leq s < 1$  zu [10]

$$\delta_{MF} = \frac{1+s}{1-s}, \quad \zeta_{MF} = \frac{1-s}{2s}, \quad \beta_{MF} = \nu \left( \frac{1-s}{2} \right), \quad (24)$$

wobei  $1/\nu = \sqrt{2(1-s)}$  für  $1-s \ll 1$  bzw.  $\nu = 1/s$  andernfalls [10]. Im Bereich  $s < 0.5$  erwarten wir Mean-Field Ergebnisse mit  $\beta_{MF} = 0.5$  und  $\delta_{MF} = 3$ . Des Weiteren kann

für alle  $s$  gezeigt werden, dass  $\zeta_{MF} = \beta_{MF}$  gilt [10].  $\beta$  wurde außerdem alternativ zur Definition in Gl. 5 über die Kopplungsstärke  $\alpha$  bestimmt:

$$\langle \sigma_{1,2}^z \rangle \sim |\alpha - \alpha_c|^{\beta_2}. \quad (25)$$

Es wurden die Exponenten für  $s = \{0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.75, 0.9\}$  berechnet. Die Ergebnisse und die dazugehörigen theoretischen Vorhersagen und die NRG Ergebnisse [10] kann man der Tabelle entnehmen.

Exponent	$s = 0.2$	$s = 0.3$	$s = 0.4$	$s = 0.5$	$s = 0.75$	$s = 0.9$
$\delta_{VMPS}$	3.3	2.9	3.1	3.4	7.4	19.3
Fehler	$\pm 0.5$	$\pm 0.2$	$\pm 0.2$	$\pm 0.1$	$\pm 0.1$	$\pm 0.1$
$\delta_{MF}$	3	3	3	3	7	19
$\delta_{NRG}$	-	-	-	4	10	40
$\beta_{1VMPS}$	0.4	0.5	0.48	0.46	0.24	0.13
Fehler	$\pm 0.2$	$\pm 0.1$	$\pm 0.08$	$\pm 0.07$	$\pm 0.06$	$\pm 0.04$
$\beta_{1MF}(\nu = 1/s)$	0.5	0.5	0.5	0.5	0.17	0.056
$\beta_{1MF}(\nu = 1/\sqrt{2(s-1)})$	0.5	0.5	0.5	0.25	0.18	0.11
$\beta_{NRG}$	-	-	-	0.5	0.2	0.09
$\zeta_{VMPS}$	0.5	0.5	0.50	0.46	0.24	0.13
Fehler	$\pm 0.3$	$\pm 0.1$	$\pm 0.09$	$\pm 0.06$	$\pm 0.07$	$\pm 0.05$
$\zeta_{MF}$	0.5	0.5	0.5	0.5	0.18	0.06
$\zeta_{NRG}$	-	-	-	0.5	0.2	0.1
$\beta_{2VMPS}$	0.5	0.5	0.5	0.46	0.24	0.13
Fehler	$\pm 0.2$	$\pm 0.2$	$\pm 0.1$	$\pm 0.08$	$\pm 0.06$	$\pm 0.05$

Die Exponenten wurden bestimmt, indem man mit den Definitionen Gl.(21) (22) (23) und (25) in der Umgebung der Phasengrenze die Magnetisierung bestimmt hat. In einem Diagramm, in dem man dann den jeweiligen Parameter gegen die Magnetisierung plottet, wobei man beide Achsen logarithmisch skaliert, ergibt sich dann ein Bereich, in dem ein linearer Anstieg zu beobachten ist. An diesen Anstieg fittet man eine Gerade und kann so den kritischen Exponenten bestimmen. Die zugehörigen Diagramme mit den interpolierten Kurven kann man im Anhang finden.

Einen Fehler für die so bestimmten Exponenten kann man gewinnen, indem man den Datenbereich, an den man die Kurve interpoliert, variiert. Man kann erkennen, dass die Mean-Field Vorhersagen im sub-ohmschen Bereich sehr gut mit unseren Ergebnissen übereinstimmen, obwohl gerade für kleine  $s$  der Fehlerbereich doch sehr groß wird. Auch für  $s = 0.5$ ,  $s = 0.75$  und  $s = 0.9$  zeigen unsere Daten gute Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen. Vor allem im Bereich knapp unter  $s = 1$  liefert VMPS deutlich bessere Ergebnisse als NRG.

## 6. Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir den Quanten-Phasenübergang des Zwei-Spin-Boson Modells untersucht, welches aus zwei Spins besteht, die an ein gemeinsames Bad koppeln und miteinander in Wechselwirkung stehen. Dabei haben wir die Phasengrenze in Abhängigkeit der Spin-Spin Kopplung  $K$  und der Spin-Bad Kopplung  $\alpha$  untersucht, die Verschränkungsentropie im Bereich der Phasengrenze betrachtet und die kritischen Exponenten des Phasenübergangs bestimmt. Die so gewonnenen Ergebnisse konnten wir teilweise mit Ergebnissen vergleichen, die mit NRG gewonnen wurden.

Nachdem wir uns zu Beginn mit den theoretischen Grundlagen beschäftigt haben, gehen wir in Abschnitt 5 auf das Zwei-Spin-Boson Modell ein. Wir haben hier zuerst den Verlauf der Phasengrenze näher untersucht und konnten eine sehr gute Übereinstimmung mit den NRG Ergebnissen feststellen. Zusätzlich konnten wir in dem für NRG nicht zugänglichen Bereich, für  $s = 0.3$ , den Verlauf der Phasengrenze berechnen. Diese Ergebnisse stimmten auch mit den Erwartungen überein.

In Kapitel 5.2. haben wir die Verschränkungsentropie für  $s = 0.5$  und  $s = 1$  und verschiedene Werte der Spin-Spin Kopplung  $K$  berechnet. Da diese Berechnungen auch mit NRG durchgeführt wurden, konnten wir unsere Ergebnisse mit diesen vergleichen und konnten gute Übereinstimmungen feststellen.

Auf die Bestimmung der kritischen Exponenten sind wir in Kapitel 5.3. eingegangen. Hier haben wir die Exponenten  $\beta, \delta$  und  $\zeta$  bestimmt, dabei haben wir den Exponenten  $\beta$  auf zwei unterschiedlichen Wegen berechnet. Von besonderem Interesse war dabei vor allem der Bereich  $0 \leq s \leq 0.5$ , da es hierzu noch keine Berechnungen gab und dieser Bereich nicht sinnvoll mit NRG untersucht werden kann. Unsere Ergebnisse bestätigen die Vorhersagen, die sich aus der quantum-to-classical correspondence im Bereich  $s < 0.5$  ergeben. Auch die Ergebnisse im Bereich  $s > 0.5$  stimmen mit den theoretischen Erwartungen überein und liefern zum Teil bessere Ergebnisse als das NRG Verfahren.

## A. Diagramme zu kritischen Exponenten

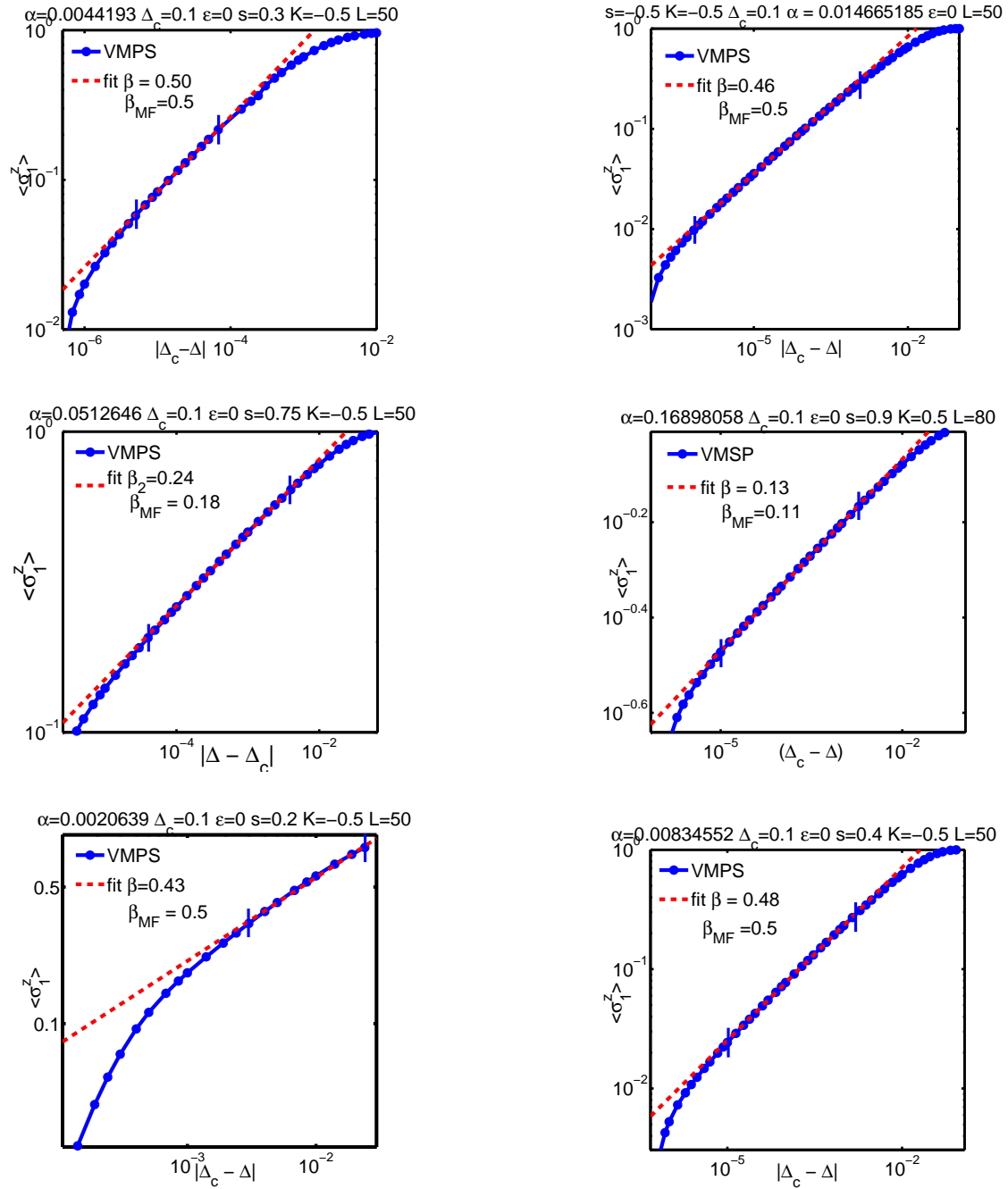


Abbildung 7: Diagramme, aus denen der kritische Exponent  $\beta$  bestimmt wurde durch Variation von  $\Delta$ .

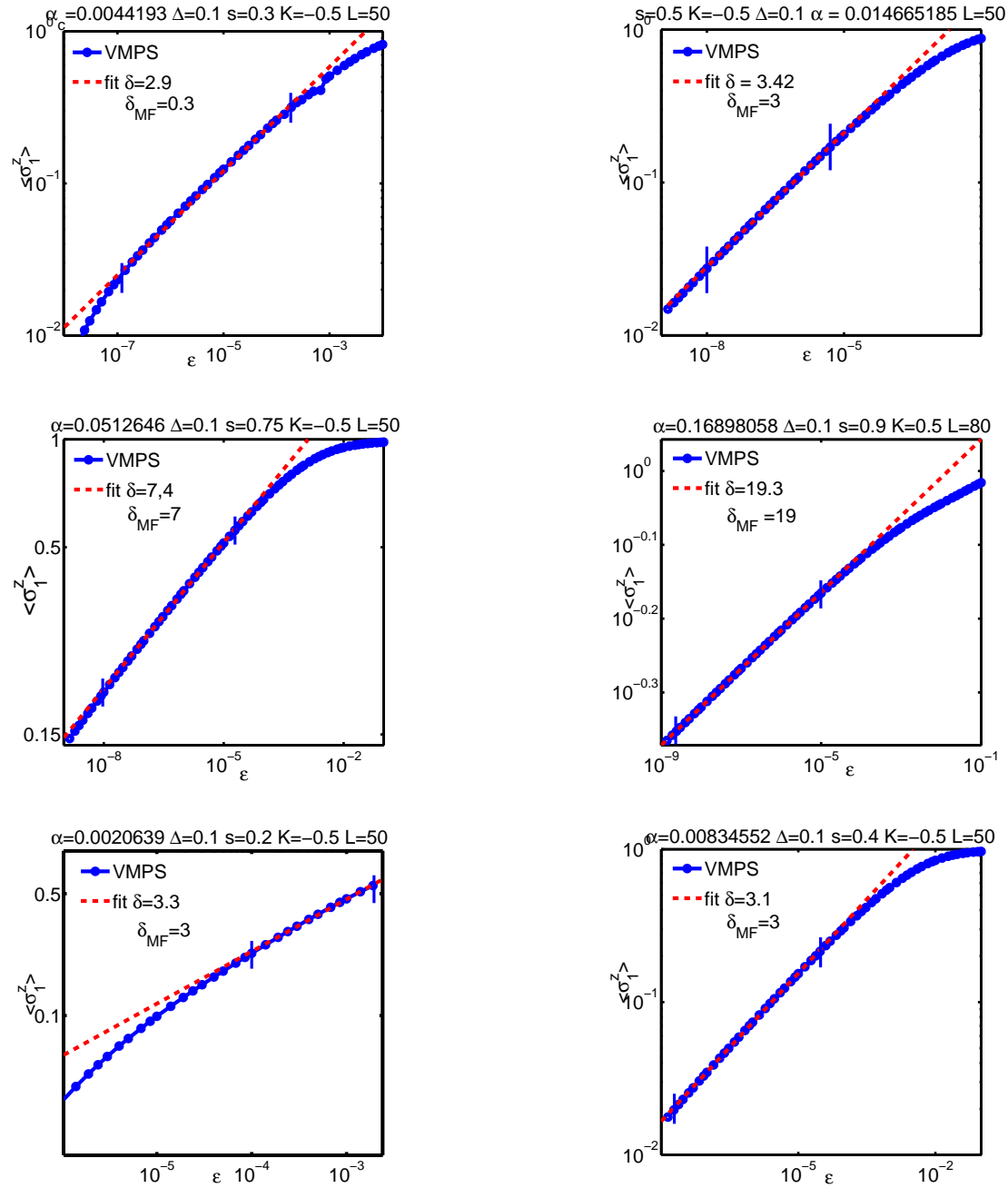


Abbildung 8: Diagramme, aus denen der kritische Exponent  $\delta$  bestimmt wurde durch Variation von  $\epsilon$  an der Phasengrenze.

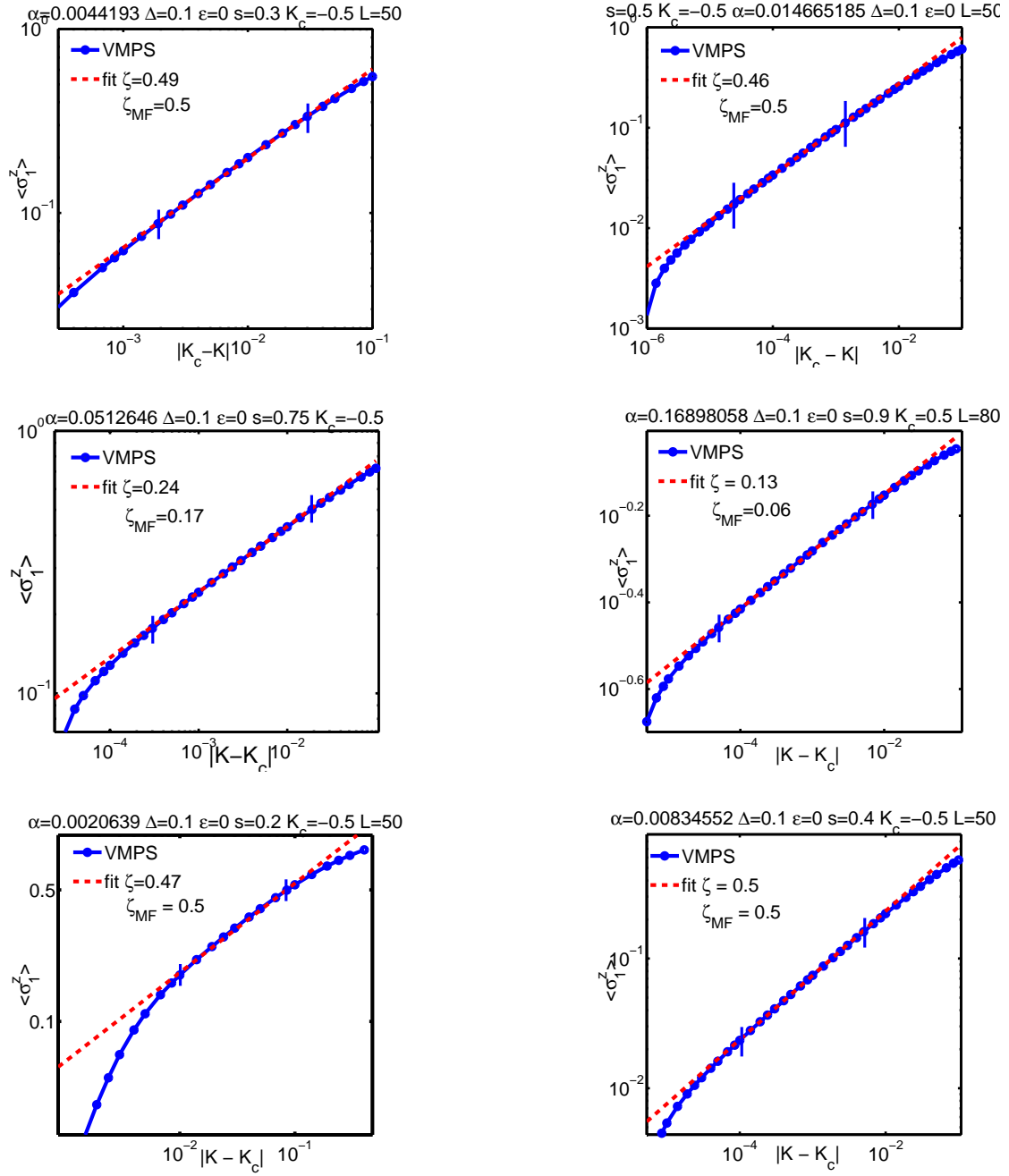


Abbildung 9: Diagramme, aus denen der kritische Exponent  $\zeta$  bestimmt wurde durch Variation von  $K$  an der Phasengrenze.

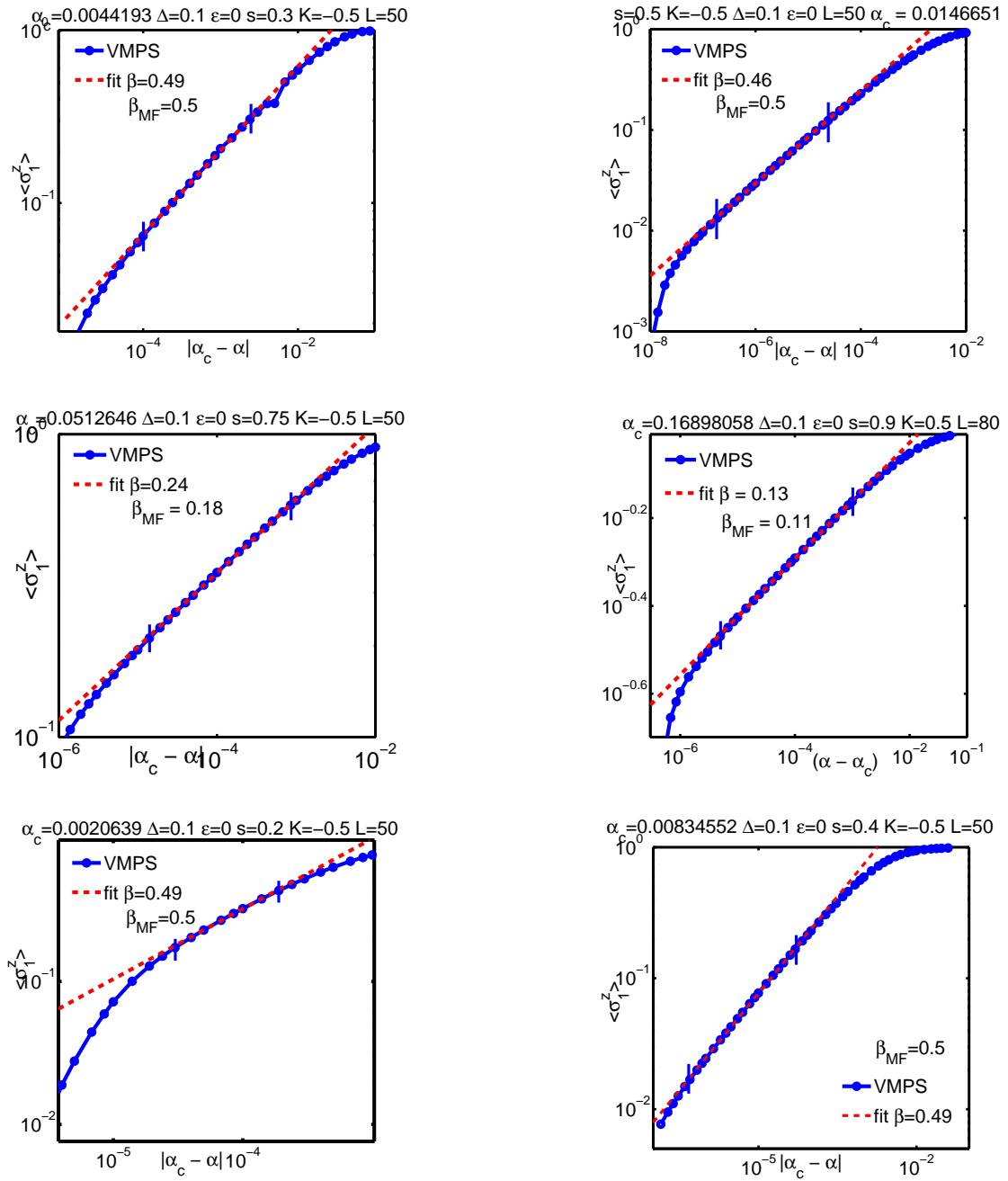


Abbildung 10: Diagramme, aus denen der kritische Exponent  $\beta$  bestimmt wurde durch Variation von  $\alpha$  an der Phasengrenze.

## B. Programmteile

### B.1. Phasengrenze

In Abschnitt 5.1.2. haben wir schon kurz beschrieben, wie die Phasengrenze bestimmt wurde. Dies wurde mit dem folgenden Programm verwirklicht.

```

...
while pre > genau
  VMPS_ ZSBM1(hx1,hx2,hz1,hz2,K,s,alpha,Lambda,L,0);
...
load(filename);
pre=alpha2 - alpha1;
if diff(results.nx(10:end))<0
  alpha1 = alpha;
  alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
elseif results.nx(35:L-5)>0.01
  alpha2 = alpha;
  alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
else
  alpha1 = alpha;
  alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
end
end
...

```

Dieses Programm geht bei der Suche nach dem Phasenübergang ähnlich vor wie das Newton Verfahren bei der Suche von Nullstellen, denn es grenzt den Phasenübergang auf ein Intervall mit der maximalen Breite “genau“ ein. Zu Beginn muss man dem Programm alle nötigen Anfangswerte des Systems angeben und außerdem ein Intervall, in dem nach dem Phasenübergang gesucht werden soll. Das Programm läuft nun für das  $\alpha$ , das in der Mitte des Anfangsintervalls liegt. Anschließend überprüft es, ob es sich in der lokalisierten oder delokalisierten Phase befindet. Dazu benutzt man den Befehl “diff(...)“, der für den eingelesenen Vektor die Differenz aufeinanderfolgender Plätze berechnet. Die Bedingung “diff(results.nx(10:end))<0“ ist also die Bedingung für die delokalisierte Phase. Befindet man sich in dieser, muss bei größerem  $\alpha$  nach dem Phasenübergang gesucht werden, und das Intervall kann halbiert werden, indem man nun das gerade benutzte  $\alpha$  zur unter Grenze des neuen Intervalls definiert. Zeigen die Besetzungszahlen, dass die Bedingung “diff(results.nx(10:end))<0“ nicht erfüllt ist, muss man prüfen, ob sich das System wirklich in der lokalisierten Phase befindet, denn wie oben beschrieben kann es in der stark delokalisierten Phase dazu kommen, dass auf den hinteren Plätzen die Besetzungszahl numerisch null ist, d.h. dass die Zahlen sehr klein sind (z.B.  $\approx 10^{-15} - 10^{-10}$ ), sodass es dazu kommen kann, dass auch hier die Bedingung von oben verletzt wird. Deshalb muss noch abgefragt werden, ob die Besetzung auf den



hinteren Plätzen ausreichend groß ist. Ist auch diese Bedingung nicht erfüllt, befindet man sich in der lokalisierten Phase, und es muss bei kleineren  $\alpha$  nach der Phasengrenze gesucht werden und das alte  $\alpha$  wird als neue obere neue Intervallgrenze definiert. Im neuen Intervall wird nun wieder in der Mitte die Berechnung durchgeführt. Dies wird so lange wiederholt bis das Intervall kleiner als ein gewünschter Wert (im Programm "genau") ist.

Die Phasengrenze für den Fall  $s = 1$  wurde mit einer Kombination aus Magnetisierung und Besetzungszahlen bestimmt. Das Programm dazu ist ähnlich aufgebaut zu dem oberen. Es wird nur die if Schleife geändert zu:

```
...
if abs(results.spin.sz(1))>0.0001
  if results.nx(40:45)>0.25
    alpha2 = alpha;
    alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
  else
    alpha1 = alpha;
    alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
else
  alpha1 = alpha;
  alpha = (alpha1 + alpha2)/2;
end
...
```

Dieses Programm funktioniert analog wie das obere nur, dass hier noch zusätzlich zu Beginn eine minimale Magnetisierung existieren muss, damit man davon ausgehen kann, dass man schon in der lokalisierten Phase ist. Die minimale Magnetisierung musste für die verschiedenen Werte von  $s$  bestimmt werden, indem man sich den Verlauf der Magnetisierung grob gegen  $\alpha$  auftragen lässt und prüft, wo eine starke Änderung der Magnetisierung geschieht.

## B.2. Verschränkungsentropie

Im Folgenden werden wir kurz erklären, wie die Verschränkungsentropie aus Abschnitt 5.2. berechnet wurden. Die Verschränkungsentropie kann aus dem ersten Element, im Folgenden  $A$  genannt, des Grundzustandes in MPS-Form berechnet werden. Dazu habe ich folgendes kleine Skript geschrieben:

```
A=mps{1};
[D1 D2 d] = size(A);
[C S D] = svd2(reshape(A,[D1*d,D2]));
P = entanglementEntropy(S);
```

```
function vNE = entanglementEntropy(S)
dim=size(S,1);
s=diag(S);
s=s./sqrt(s'*s);
entropy=0;
for x=1:dim
    if(s(x)>1e-16)
        entropy=entropy-s(x).^2.*(log2(s(x).^2));
    end
end
vNE=entropy;
```

In der oberen Box wird als erstes das MPS Ergebnis in  $A$  geschrieben. Da dieses  $A$  von der Dimension  $[D1 D2 d]$  ist, muss dieses mit dem `reshape` Befehl umgeordnet werden, so dass man nun eine Matrix der Dimension  $(D1 * d) \times D2$  hat. An dieser Matrix wird nun eine Singulärwertzerlegung durchgeführt, aus der man dann einfach die Verschränkungsentropie berechnen kann. Dies geschieht mit dem Programm in der zweiten Box, in der nur die Definition aus Gl.(20) implementiert wurde.

## Literatur

- [1] A. Alvermann and H. Fehske. Sparse Polynomial Space Approach to Dissipative Quantum Systems: Application to the Sub-Ohmic Spin-Boson Model. *Phys. Rev. Lett.*, 102:150601, Apr 2009.
- [2] Ralf Bulla, Hyun-Jung Lee, Ning-Hua Tong, and Matthias Vojta. Numerical renormalization group for quantum impurities in a bosonic bath. *Phys. Rev. B*, 71:045122, Jan 2005.
- [3] Ralf Bulla, Ning-Hua Tong, and Matthias Vojta. Numerical Renormalization Group for Bosonic Systems and Application to the Sub-Ohmic Spin-Boson Model. *Phys. Rev. Lett.*, 91:170601, Oct 2003.
- [4] Cheng Guo, Andreas Weichselbaum, Jan von Delft von Delft von Delft, and Matthias Vojta. Critical and Strong-Coupling Phases in One- and Two-Bath Spin-Boson Models. *Phys. Rev. Lett.*, 108:160401, Apr 2012.
- [5] K. Le Hur. Entanglement entropy, decoherence, and quantum phase transitions of a dissipative two-level system. *Annals of Physics*, 323(9):2208–2240, 2008.
- [6] A. ISAR, A. SANDULESCU, H. SCUTARU, E. STEFANESCU, and W. SCHEID. OPEN QUANTUM SYSTEMS. *International Journal of Modern Physics E*, 03(02):635–714, 1994.
- [7] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, Matthew P. A. Fisher, Anupam Garg, and W. Zwerger. Dynamics of the dissipative two-state system. *Rev. Mod. Phys.*, 59:1–85, Jan 1987.
- [8] Yuriy Makhlin, Gerd Schön, and Alexander Shnirman. Quantum-state engineering with Josephson-junction devices. *Rev. Mod. Phys.*, 73:357–400, May 2001.
- [9] R.A. Marcus and N. Sutin. Electron Transfers in Chemistry and Biology. *Biochim. Biophys. Acta*, 811:265, Dec 1985.
- [10] Peter P. Orth, David Roosen, Walter Hofstetter, and Karyn Le Hur. Dynamics, synchronization, and quantum phase transitions of two dissipative spins. *Phys. Rev. B*, 82:144423, Oct 2010.
- [11] D. Porras, F. Marquardt, J. von Delft, and J. I. Cirac. Mesoscopic spin-boson models of trapped ions. *Phys. Rev. A*, 78:010101, Jul 2008.
- [12] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326:96, Jan 2011.
- [13] Ulrich Schollwöck. Vorlesungsskript Quantum Matter. Website, 2012. [http://www.physik.uni-muenchen.de/lehre/vorlesungen/wise\\\_12\\\_13/quantum/lectures/index.html](http://www.physik.uni-muenchen.de/lehre/vorlesungen/wise\_12\_13/quantum/lectures/index.html).

- 
- [14] Matthias Vojta. Quantum phase transitions. *Rep. Prog. Phys.*, 66:2069, Dec 2003.
- [15] Matthias Vojta, Ning-Hua Tong, and Ralf Bulla. Quantum Phase Transitions in the Sub-Ohmic Spin-Boson Model: Failure of the Quantum-Classical Mapping. *Phys. Rev. Lett.*, 94:070604, Feb 2005.
- [16] André Winter, Heiko Rieger, Matthias Vojta, and Ralf Bulla. Quantum Phase Transition in the Sub-Ohmic Spin-Boson Model: Quantum Monte Carlo Study with a Continuous Imaginary Time Cluster Algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 102:030601, Jan 2009.

## Danksagung

Ich möchte mich bei Prof. von Delft bedanken, dass er mir die Möglichkeit gegeben hat, an diesem sehr interessanten Thema zu arbeiten.

Ganz besonders möchte ich Benedikt Brougnolo danken, der mir immer geholfen hat, wenn ich Fragen oder Probleme hatte.

**Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und nur die im Literaturverzeichnis aufgeführten Quellen verwendet habe.

München, den 11. Juni 2013