Hochtemperaturentwicklung für Spinketten

und

effektive Spinmodelle für Spin-Peierls-Systeme

Diplomarbeit

Alexander Bühler

Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

Juni 1999

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Modell **4**

3 Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität **5**
3.1 Methode 7
3.1.1 Lanczos-Algorithmus und Ergebnisse 10
3.1.2 Implementierung 12
3.1.3 Momente-Algorithmus 15
3.1.4 Implementierung 16
3.2 Finite-size Korrekturen 19

4 Bestimmung der spezifischen Wärme und der Entropie **23**

5 Verbesserte Darstellungen und Vergleiche **24**
5.1 Kettenbruch-Darstellung 25
5.2 Berücksichtigung des Tieftemperaturverhaltens 36
5.3 Vergleich mit Bethe-Ansatz 44
5.4 Vergleich mit DMRG 47

6 Darstellungen mit Hilfe der Dispersion **51**

7 Effektive Spinmodelle **59**
7.1 Grundlagen der Flußgleichungen 59
7.2 Spin-Peierls-Phase 63
7.3 Nichtadiabatische Beschreibung der Spin-Phonon-Kopplung . . . 64
7.4 Vergleich mit DMRG 70

8 Fazit und Ausblick **76**

A Matrix des Heisenbergoperators **78**

B Daten nach linked-cluster-Methode **80**

C Suszeptibilitäten **80**

D Zustandssummen **82**

E Differentialgleichungen für effektives Spinmodell **83**

1 Einleitung

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile. Beide Teile beschäftigen sich mit eindimensionalen Spinmodellen. Diese dienen in vielfältiger Weise der theoretischen Beschreibung von Festkörpern. Motiviert wird dieser Zugang durch Messungen an verschiedenen Substanzen, die sich aufgrund ihrer quasi eindimensionalen Struktur in erster Näherung mit Hilfe von Spinketten modellieren lassen. Nur wenige dieser eindimensionalen Systeme sind exakt lösbar. Sehr oft ist man auf störungstheoretische Ansätze angewiesen, die einen kleinen Parameter benötigen, nach dem entwickelt wird.
Der erste Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigt sich mit der Hochtemperaturentwicklung, d.h. der Entwicklung nach dem kleinen Parameter $\beta = 1/k_B T$, von frustrierten isotropen $S=1/2$-Ketten. Das Ziel ist die Bestimmung von temperaturabhängigen Größen wie die Suszeptibilität und spezifische Wärme. Diese Größen sind im allgemeinen experimentell sehr gut zugänglich, so daß generell die theoretischen Resultate mit dem Experiment verglichen werden können.
In der vorliegenden Arbeit handelt es sich um einen neuentwickelten Zugang zur Hochtemperaturentwicklung. Dabei werden Systeme betrachtet, in denen nur Nächstnachbar-Wechselwirkung und Übernächstnachbar-Wechselwirkung berücksichtigt werden. Letztere bezeichnet man als frustriert. Als Ausgangspunkt für die Modellierung des Systems dient das Heisenbergmodell. Das Heisenbergmodell beschreibt die Wechselwirkung lokaler magnetischer Momente und bildet die Grundlage zur Beschreibung kollektiver magnetischer Phänomene.
Ein erstes Ziel ist die Berechnung der Suszeptibilität bei verschwindendem Magnetfeld, dargestellt durch ein Polynom in β und im Fall der frustrierten $S=1/2$-Kette dargestellt durch ein Polynom in β und der relativen Übernächstnachbar-Kopplung α. Somit steht für die Suszeptibilität ein analytischer Ausdruck zur Verfügung.
Die Berechnung der Suszeptibilität erfordert die Bestimmung der großkanonischen Zustandssumme für das betreffende System. Mit Hilfe der Zustandssumme kann man weitere thermodynamische Größen ableiten. In der vorliegenden Arbeit wird dabei zusätzlich auf die Berechnung bzw. Entwicklung der spezifischen Wärme und der Entropie eingegangen.
Zur Durchführung der 1/T-Entwicklung werden verschiedene Methoden verwendet, zum einen ein Lanczos-Algorithmus und zum anderen ein sogenannter Momente-Algorithmus. Der Lanczos-Algorithmus zeichnet sich dadurch aus, daß er die Hochdimensionalität des vorliegenden Problems auf ein niedrigdimensionales zurückführt, wodurch die Berechnungen vereinfacht werden. Jedoch ist die Implementierung der computergestützten Rechnungen immens speicheraufwendig. Der Momente-Algorithmus nutzt die Möglichkeiten der Optimierungen für das vorliegende Problem effektiver aus. Über den Momente-Algorithmus werden die Erwartungswerte von Potenzen des Hamiltonoperators bezüglich ausgezeichneter Zustände berechnet.
Da zur Berechnung der physikalischen Größen kein unendlich großes System be-

trachtet werden kann, das den thermodynamischen Limes beschreibt, wird die durch den Speicher der zur Verfügung stehenden Computer begrenzte Systemgröße maximal ausgenutzt. Dadurch kommt es zu finite-size-Effekten, die im weiteren eingehend untersucht bzw. bestimmt werden müssen.
Zur besseren Ausnutzung der gewonnenen Informationen, werden die berechneten Polynome in einer Padé-Approximation genähert. Es handelt sich hierbei um Kettenbruchdarstellungen, die vernünftige Aussagen für die berechneten Ergebnisse zu tieferen Temperaturen hin erlauben, als dies für die Polynome möglich ist. Zur weiteren Verbesserung der Darstellungen werden im nächsten Schritt Informationen über den Tieftemperaturbereich miteingebunden. Es handelt sich hierbei um allgemeine Eigenschaften der jeweiligen physikalischen Größe im Tieftemperaturbereich. Die so gewonnenen Ausdrücke liefern eine bessere Beschreibung der jeweiligen Größe.
In einem Vergleich der unfrustrierten $S = 1/2$-Kette zum einen mit exakten Ergebnissen aus dem Bethe-Ansatz und zum anderen mit Resultaten, die mit Hilfe des Theorems zusammenhängender Cluster bestimmt wurden, werden die gewonnen Ergebnisse vorgestellt und diskutiert. Da der Bethe-Ansatz für die frustrierte $S=1/2$-Kette nicht möglich ist, werden die Ergebnisse in diesem Fall mit numerischen Resultaten aus DMRG-Rechnungen verglichen.
Ein eigener Abschnitt der Arbeit beschäftigt sich mit Darstellungen der Suszeptibilität der unfrustrierten $S=1/2$-Kette mit Hilfe von Dispersionsdaten. Es handelt sich dabei um eine Darstellung der Suszeptibilität über die Dispersion, die für die dimerisierte, frustrierte $S=1/2$-Kette bestimmt wurde. In der vorliegenden Arbeit soll diese Darstellung zur Bestimmung der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette erweitert werden. Dies stellt den ungünstigsten Fall dar, und zwar der Darstellung für eine unfrustrierte Kette. Da die Dispersion für die unfrustrierte Kette bekannt ist, werden durch diesen Zugang Informationen über den Tieftemperaturbereich miteingebunden. Durch die Darstellung über eine verallgemeinerte T-Variable, die beide Grenzwerte $T \to 0$ und $\beta \to 0$ korrekt erfaßt, erhält man schon mit wenigen Informationen einen gute Beschreibung der Suszeptibilität.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit $S = 1/2$-Ketten gekoppelt an Gitterschwingungen (Phononen). Gerade durch die Ankopplung an Phononen entstehen interessante physikalische Effekte. Ein Beispiel hierfür ist der Spin-Peierls-Übergang, der z.B. in $CuGeO_3$ [1] zu beobachten ist. Andere Substanzen wie $\alpha' - NaV_2O_5$ [2] zeigen ebenfalls Anzeichen für einen Spin-Peierls-Übergang. Bisherige Beschreibungen dieses Phasenübergangs gehen zumeist von einer adiabatischen Behandlung der Phononen aus. Experimentelle Daten zu $CuGeO_3$ widersprechen jedoch der Voraussetzung der adiabatischen Näherung.
In der vorliegenden Arbeit wird ein effektives Spinmodell mit Hilfe der Flußgleichungen hergeleitet. Die Methode der Flußgleichungen basiert auf kontinuierlichen unitären Transformationen, die einen gegebenen Hamiltonoperator in eine einfachere Gestalt überführen, im günstigsten Fall in Diagonalgestalt. Das

Ziel des zweiten Teils der Arbeit ist es, ein effektives Spinmodell abzuleiten, das implizit die Ankopplung an Gitterschwingungen enthält. Motiviert wird dieser Zugang durch die anorganische Spin-Peierls-Substanz $CuGeO_3$. Es handelt sich um eine nichtadiabatische Beschreibung der Phononen. Mit Hilfe der Flußgleichungen soll das magnetische Subsystem von dem Subsystem der Phononen entkoppelt werden.
Erste Ergebnisse zeigen, daß die Kopplung an Phononen zusätzliche langreichweitige Spinwechselwirkungen erzeugt, und daß die Spinkopplungen eine Temperaturabhängigkeit aufweisen. Das Fernziel dieser Berechnungen soll sein, die aus dem zweiten Teil der Arbeit gewonnenen Informationen zu verwenden, die Darstellung der Suszeptibilität und anderer physikalischen Größen aus dem ersten Teil der vorliegenden Arbeit z.B. bezüglich der Spinkopplungen soweit zu verbessern, daß sie genutzt werden können, um die Modellparameter durch den Vergleich mit experimentellen Daten genauer bestimmen zu können.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in acht Abschnitte. Im folgenden Abschnitt wird das Modell zur Beschreibung der $S = 1/2$-Kette behandelt und motiviert. Der daran anschließende Abschnitt befaßt sich ausführlich mit den angewandten Methoden und deren Implementierung in einem Computerprogramm. Am Ende dieses Abschnittes werden die benötigten finite-size-Korrekturen genauer untersucht. Die Bestimmung der spezifischen Wärme und der Entropie aus den Ergebnissen der vorangegangenen Rechnungen wird in Abschnitt 4 abgeleitet. Im 5. Abschnitt werden verbesserte Darstellungen der bisherigen Ergebnisse und deren Vergleich zum Teil mit exakten Resultaten und zum Teil mit numerischen Ergebnissen vorgestellt. Abschnitt 6 befaßt sich mit verschiedenen Darstellungen der Suszeptibilität mit Hilfe der Dispersion. Der 7. Abschnitt hat die Beschreibung der Methode der Flußgleichungen und deren Anwendung auf ein an Phononen gekoppeltes Spinsystem zum Thema. Der letzte Abschnitt faßt die Ergebnisse zusammen und gibt einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen.

2 Modell

Da gerade in den letzten Jahren verschiedene experimentelle Substanzen wie $CuGeO_3$ [1], $\alpha' - NaV_2O_5$ [2], $SrCu_2O_3$ [3], $KCuF_3$ [4], $(VO)_2P_2O_7$ [5] synthetisiert wurden, die man in erster Näherung als quasi eindimensionale frustrierte Heisenbergketten beschreiben kann, ist man sehr an den Eigenschaften solcher Ketten interessiert. Ein besonderer Schwerpunkt liegt in der vorliegenden Arbeit auf $CuGeO_3$. Viele Ergebnisse werden mit den für $CuGeO_3$ entsprechenden Parametern dargestellt.

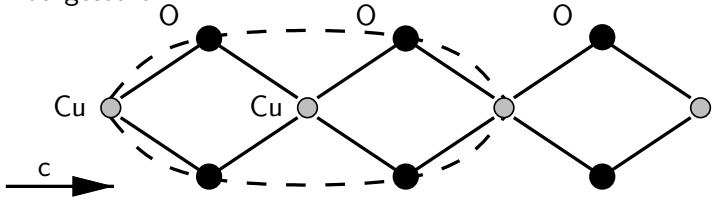


Abbildung 2.1: Am Beispiel von $CuGeO_3$ sind die Nächstnachbar-Kopplung (Superaustausch) entlang durchgezogener Linien und die Übernächstnachbar-Kopplung entlang gestrichelter Linien dargestellt.

In der vorliegenden Arbeit wird das Modell der frustrierten $S = 1/2$ Heisenbergkette untersucht. Der Hamiltonoperator für eine Kette mit N Plätzen mit Nächstnachbar- und Übernächstnachbar-Kopplung lautet

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{N} (J\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} + \alpha J\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2} - h\hat{S}_i^z) \ , \tag{2.1}$$

wobei α das Verhältnis zwischen Übernächstnachbar- und Nächstnachbar-Kopplung beschreibt und h gleich $g\mu_B H$ ist mit dem Magnetfeld H. Beim letzten Term handelt es sich um den Beitrag der Zeemann-Energie. Damit die Translationsinvarianz im endlichen System erhalten bleibt, gelten periodische Randbedingungen $N + i = i$. Diese sind im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit wichtig.

Für den Fall $\alpha = 0$ und $S = 1/2$ sind exakte Ergebnisse vorhanden (Grundzustand: Bethe 1931 [6]), ebenso für die Suszeptibilität, die gleichfalls mit Hilfe des Bethe-Ansatzes berechnet wurde [7]. Jedoch ist es nicht möglich, über den Bethe-Ansatz eine exakte Lösung für die frustrierte Kette anzugeben. Eine Ausnahme bildet der sogenannte Majumdar-Ghosh-Punkt $\alpha = 1/2$, für den der Grundzustand bekannt ist [8, 9]. Hier liegt ein perfekter Singulettproduktzustand mit kurzreichweitigen Nächstnachbar-Korrelationen vor.

Ein anderer besonderer Fall ist $\alpha \approx 0.241167$. Für α-Werte oberhalb dieses kritischen Wertes öffnet sich in der Dispersionsrelation eine Lücke, so daß für angeregte Zustände $\omega(0) > 0$ gilt [10, 11]. Es liegt eine spontane Symmetriebrechung der Translationssymmetrie vor [12]. Im Grundzustand binden sich benachbarte Paare von Spins bevorzugt zu einem Singulett. Es handelt sich um

einen zweifach entarteten Grundzustand mit einem alternierenden Erwartungswert $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle$.

Bei antiferromagnetischer Kopplung $J > 0$ werden aufgrund der Übernächstnachbar-Wechselwirkung die Neél-artigen Zustände geschwächt. Um diesen Sachverhalt zu verdeutlichen, betrachtet man die unfrustrierte Kette im klassischen Limes, in der man die Spinoperatoren $\mathbf{S}_i$ als klassische Vektoren darstellt. Bei antiferromagnetischer Kopplung ist die antiparallele Ausrichtung der Spins zueinander die energetisch günstigste. Diesen Zustand nennt man Neélzustand. Er stellt im klassischen System den Grundzustand dar. In Abbildung 2.2 ist der

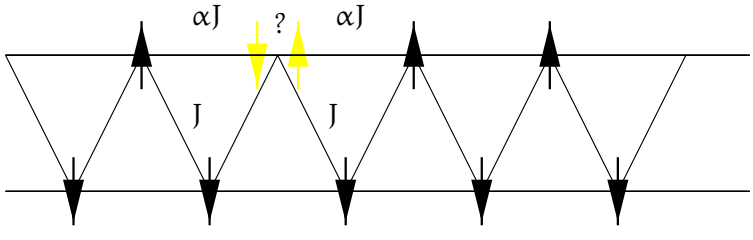


Abbildung 2.2: Effekt der Frustration (Darstellung der z-Komponente des Spins)

Effekt der Frustration illustriert. Dabei sind hier zur Veranschaulichung des Problems die Nächstnachbar-Kopplung zickzackförmig und die Übernächstnachbar-Kopplung entlang der Holme dargestellt. Frustration ist also ein Effekt, der erst durch die Hinzunahme der Übernächstnachbar-Kopplung entsteht. Dieser Effekt ist nur in eindimensionalen Systemen zu beobachten. Im Néelzustand stellt die endliche Untergittermagnetisierung eine langreichweitige Ordnung dar, die die Symmetrie der Spinrotation bricht [13]. Es sei erwähnt, daß im Quantensystem der Néelzustand kein Grundzustand mehr der unfrustrierten bzw. frustrierten Heisenbergkette ist.

3 Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität

Bei der konventionellen Hochtemperaturentwicklung wird eine thermodynamische Dichte wie z.B. die freie Energie pro Platz $f(\beta = 1/k_B T)$ um $\beta = 0$ entwickelt. Es handelt sich um eine Störungsrechnung, derren kleiner Parameter β ist. Dabei führt die Hochtemperaturentwicklung z.B. auf die Berechnung von Kumulanten oder die Bestimmung zusammenhängender Cluster. Einen guten Überblick der bisher verwendeten Methoden zur Hochtemperaturentwicklung im Heisenbergmodells gibt Ref. [14]. In Anhang B ist das Ergebnis einer Hochtemperaturentwicklung mittels des Theorems zusammenhängender Cluster [15] aufgeführt.
Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird ein alternativer Zugang für die rechnergestützte Hochtemperaturentwicklung zunächst der Suszeptibilität gewählt.

Im weiteren Verlauf der Arbeit werden auch andere Größen wie die spezifische Wärme und die Entropie in dieser Weise entwickelt.
Der wesentliche Unterschied zu den konventionellen Verfahren besteht darin, daß Zähler und Nenner der Suszeptibilität $\chi(T)$ mit

$$\chi(T) \quad = \quad \frac{\beta}{N}\frac{\mathrm{Sp}(M^2 e^{-\beta \mathbf{H}})}{\mathrm{Sp}(e^{-\beta \mathbf{H}})} \tag{3.1}$$

getrennt voneinander entwickelt werden. Im Vergleich zu den konventionellen Verfahren werden hier die zusammenhängenden Cluster mittels endlicher Systeme bestimmt. Das Theorem zusammenhängender Cluster [15] gewährleistet Ergebnisse im thermodynamischen Limes.
Die Größen in Zähler und Nenner sind für sich genommen noch nicht unabhängig von der Systemgröße. Das Ziel ist es, eine systemgrößenunabhängige Funktion zu bestimmen. Um die Abhängigkeiten von der Systemgröße zu beseitigen, wird die gebrochen rationale Funktion 3.1 wiederum um $\beta = 0$ entwickelt, so daß man am Ende einen analytischen Ausdruck, ein Polynom in β, erhält. Bei der letzten Entwicklung heben sich die verschiedenen Abhängigkeiten von der Systemgröße Term für Term auf. Eine andere Möglichkeit gibt es auch nicht, da die berechnete Größe keine Systemgrößenabhängigkeiten aufweist. Die Koeffizienten des Polynoms für χ sind rationale Zahlen, so daß die Ergebnisse bis zu der berechneten Ordnung absolut exakt sind.

$$\left.\frac{\langle S|M^2 e^{-\beta \mathbf{H}}|S\rangle \quad \overset{\beta=0}{\rightsquigarrow\rightsquigarrow}}{\langle S|e^{-\beta \mathbf{H}}|S\rangle \quad \overset{\beta=0}{\rightsquigarrow\rightsquigarrow}}\right\} \overset{\beta=0}{\rightsquigarrow\rightsquigarrow} \text{ Polynom} \tag{3.2}$$

Da bei den Berechnungen nur endliche Systeme betrachtet werden können, müssen auftretende finite-size Effekte besonders beachtet werden. Die Entwicklung nach Potenzen von β entspricht einer Entwicklung nach Potenzen von $\mathbf{H}$, wie man aus der Entwicklung der Expotentialfunktion erkennen kann.
Betrachtet man den Hamiltonoperator 2.1, so besteht dieser aus einer Summe aus „lokalen“ Termen, die auf nächste Nachbarn bzw. übernächste Nachbarn der unfrustrierten bzw. frustrierten Kette wirken. Die Anwendung des Hamiltonoperators bildet somit lokale Cluster, die man durch den bond zwischen den beteiligten Plätzen darstellen kann. Über das Theorem zusammenhängender Cluster [15] können Entwicklungen physikalischer Größen über die Bestimmung der entstehenden Cluster berechnet werden. Dabei werden die entstehenden Cluster jeweils mit einem Gewicht versehen aufsummiert. Viele Cluster haben das gleiche Gewicht, da sie aus Symmetriegründen gleiche Beiträge liefern. Durch die Translationssymmetrie entstehen z.B. viele Cluster der gleichen Art. Das Theorem besagt unter anderem, daß man nur die zusammenhängenden Cluster betrachten muß, da alle unzusammenhängenden Cluster ein Gewicht von Null haben. Für die vorliegende Arbeit gibt dieser Sachverhalt einen Anhaltspunkt bis zu welcher Ordnung von $\mathbf{H}$ man eine endliche Kette entwickeln darf.

Das größte zusammenhängende Cluster muß noch vollständig erfaßt sein, um korrekte Ergebnisse zu erhalten.
Betrachtet man die unfrustrierte Kette, so kommt durch jede Anwendung des Hamiltonoperators ein bond mehr zum jeweils größten zusammenhängenden Cluster hinzu. Da eine Kette mit N Plätzen $N-1$ bonds besitzt, kann man bis H^{N-1} entwickeln, da dann gerade noch der größte zusammenhängende Cluster richtig beschrieben wird. In der vorliegenden Arbeit wird jedoch aus technischen Gründen bis H^N entwickelt, so daß finite-size Effekte auftreten, die in Abschnitt 3.2 genauer untersucht werden.
Ein erster Anhaltspunkt für die nachfolgenden Berechnungen der Suszeptibilität ist die $1/T$-Abhängigkeit des führenden Terms der Entwicklung unabhängig von der Kopplungskonstanten (Curie-Gesetz). Dieser Term zeigt, daß für paramagnetische Systeme die thermische Unordnung der Ausrichtung der „permanenten Momente“ durch das angelegte Feld entgegenwirkt. Dies ist eine charakteristische Größe für den Hochtemperaturbereich ($k_B T \gg J$), in dem die Spins als unabhängig voneinander betrachtet werden können, da keine Korrelationen zwischen verschiedenen Spins bestehen[1]. Der nächst höhere Term der Entwicklung, $1/T^2$, wird durch das Curie-Weiss-Gesetz beschrieben. Für ferromagnetische Kopplung ist das Vorzeichen dieses Termes positiv und für antiferromagnetische Kopplung negativ. Formal können die ersten beiden Terme der Entwicklung für die $S=1/2$-Kette als

$$\chi(T) = \frac{1}{4T}\left(1-\frac{1}{2}\frac{J}{T}\right) \tag{3.3}$$

geschrieben werden.

3.1 Methode

Zur Bestimmung von thermodynamischen Größen des Quantenspinsystems ist man gezwungen, die Spur von Operatoren auszuwerten. Es ist nur in wenigen Fällen möglich, einen geschlossen lösbaren Ausdruck abzuleiten. Die Berechnung der Spur ist meist sehr aufwendig, da hier bezüglich aller möglichen Basiszustände des physikalischen Systems Erwartungswerte der jeweiligen Operatoren bestimmt werden müssen. Daher wurde nach einer einfacheren Möglichkeit gesucht, die Spursumme für einen Operator $\hat{A}$ zu berechnen. Die vorliegende Methode ist auf das hier betrachtete System der Spin-1/2 Kette zugeschnitten, läßt sich aber auch problemlos auf Spins beliebiger Größe übertragen.
Die Methode ist durch zwei einfache Schritte gekennzeichnet

i. Platzverdopplung, Erweiterung des Hilbertraumes

ii. Einführen eines Singulettproduktzustandes

[1] Formal ist $e^{-J\sum\cdots/k_B T} \longrightarrow 1$ zum einen der Hochtemperaturlimes, als auch der Limes verschwindender Austauschwechselwirkung J, da $J/k_B T$ der relevante Parameter ist.

Im ersten Schritt wird neben die eigentliche Kette eine zweite virtuelle Kette gelegt, so daß jeder Platz auf der realen Kette ein Gegenüber auf der virtuellen Kette besitzt. Dies ist eine rein formale Konstruktion. Das Interesse besteht

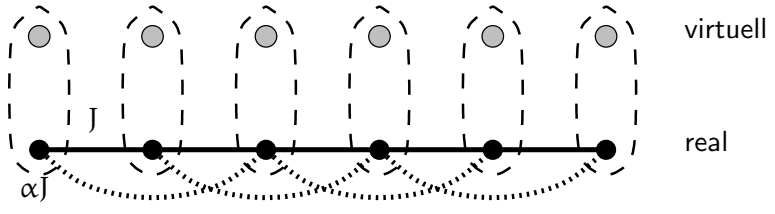


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Methode der Platzverdoppelung und der Wirkung von $\mathbf{H}$

weiterhin an der isotropen Heisenbergkette und nicht in einem Leitersystem.
Der nächste Schritt besteht in der Einführung eines Singulettproduktzustandes $|S\rangle$ mit:

$$|S\rangle = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_r\downarrow_v\rangle - |\downarrow_r\uparrow_v\rangle)\Big|_i \ , \tag{3.4}$$

wobei der Index r für die reale Kette und v für die virtuelle Kette steht. Gegenüberliegende Plätze auf realer und virtueller Kette bilden also jeweils ein Singulett.
Für allgemeinen Spin erweitert sich der Zustand eines Singuletts zu

$$|S\rangle_{allg.} = \frac{1}{\sqrt{2S+1}} \sum_{i=0}^{2S} (-1)^i |(S-i)_r, (i-S)_v\rangle \ . \tag{3.5}$$

Mit diesem allgemeinen Ausdruck läßt sich die Methode der Platzverdoppelung durch Bildung des Produktzustandes auf Spins beliebiger Größe anwenden.
Mit der Platzverdoppelung ist eine Erweiterung des Hilbertraumes verbunden. Daher können die ursprünglichen Operatoren nicht mehr weiterverwendet werden, da diese nur in dem kleineren Hilbertraum der realen Kette operieren. Man muß die Wirkung der Operatoren aus dem ursprünglichen System ($\hat{A}$) im erweiterten System ($\hat{A}_{erw}$) bestimmen. Dies soll eine möglichst einfache Erweiterung sein. Die Operatoren $\hat{A}_{erw}$ sollen auf die reale Kette wie die ursprünglichen Operatoren $\hat{A}$ wirken und auf die virtuelle Kette wie die Identität. Somit ergibt sich der Hilbertraum $\mathfrak{F}_{\hat{A}_{erw}}$ des erweiterten Systems aus dem Ursprünglichen und der Identität

$$\mathfrak{F}_{\hat{A}_{erw}} = \mathfrak{F}^r_{\hat{A}} \otimes \mathfrak{F}^v_{id} \ . \tag{3.6}$$

Mit der Operatordefinition $\hat{A} \to \hat{A}_{erw}$ ist auch gewährleistet, daß weiterhin nur das ursprüngliche Problem betrachtet wird. In Abbildung 3.1 ist die Methode der Platzverdopplung und der Wirkung von $\mathbf{H}$ schematisch dargestellt.

Durch diese Konstruktion läßt sich die Spursumme eines Operators $\hat{A}$ im ursprünglichen System im erweiterten System als einfacher Erwartungswert $\hat{A}_{erw}$ bezüglich des Singulettproduktzustandes 3.4 darstellen. Für einen einzelnen Spin ist dieser Zusammenhang direkt ersichtlich

$$\begin{aligned} Sp\hat{A} &= \langle\uparrow|\hat{A}|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{A}|\downarrow\rangle \\ &= \langle\uparrow_r\downarrow_v|\hat{A}_{erw}|\uparrow_r\downarrow_v\rangle + \langle\downarrow_r\uparrow_v|\hat{A}_{erw}|\downarrow_r\uparrow_v\rangle \\ &= \langle S|\hat{A}_{erw}|S\rangle \ , \end{aligned} \tag{3.7}$$

und läßt sich auf Ketten beliebiger Längen übertragen

$$\begin{aligned} \langle S|\hat{A}_{erw}|S\rangle &= \prod_{i,j} (\langle\uparrow_r\downarrow_v| - \langle\downarrow_r\uparrow_v|)_i \ \hat{A}_{erw} \ (|\uparrow_r\downarrow_v\rangle - |\downarrow_r\uparrow_v\rangle)_j \\ &= \prod_i \left(\langle\uparrow_r\downarrow_v|_i \hat{A}_{erw} |\uparrow_r\downarrow_v\rangle_i + \langle\downarrow_r\uparrow_v|_i \hat{A}_{erw} |\downarrow_r\uparrow_v\rangle_i\right) \\ &= \prod_i \sum_{\uparrow,\downarrow} \langle\cdot|_i \hat{A} |\cdot\rangle_i \\ &= Sp\left(\hat{A}\right) \ . \end{aligned} \tag{3.8}$$

Damit kann im vorliegenden Fall die Spur der Spinoperatoren, die auf der Heisenbergkette operieren, mit Hilfe einfacher Erwartungswerte dargestellt werden. Wie man erkennt, leistet der Triplettzustand mit $S^z = 0$ das Gleiche.
Mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ aus Gleichung 2.1 kann man nun die Suszeptibilität $\chi(T)$ für verschwindendes Magnetfeld bestimmen

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \frac{1}{N}\frac{\partial M}{\partial h}\bigg|_{h=0} \\ &= \frac{1}{N}\beta(< M^2 > - < M >^2)|_{h=0} \\ &= \frac{1}{N}\beta < M^2 > |_{h=0} \\ &= \frac{1}{N}\beta\frac{Sp(M^2 e^{-\beta\mathbf{H}})}{Sp(e^{-\beta\mathbf{H}})}\bigg|_{h=0} \\ &= \frac{1}{N}\beta\frac{\langle S|(Me^{-\beta\mathbf{H}^{erw}}M)|S\rangle}{\langle S|(e^{-\beta\mathbf{H}^{erw}})|S\rangle}\bigg|_{h=0} \ , \end{aligned} \tag{3.9}$$

wobei h das Magnetfeld in Einheiten von $g\mu_B$ und $M = \sum_{i=1}^{N} S_i^z$ die Magnetisierung ist. Da $[\mathbf{H}, M] = 0$ gilt, ist die Reihenfolge von $\mathbf{H}$ und M in Gleichung 3.9 irrelevant.
In der weiteren Arbeit werden die Operatoren aus dem erweiterten Hilbertraum wie die Ursprünglichen benannt. In Anhang A ist die Matrix des Hamiltonoperators 2.1 aus dem erweiterten Hilbertraum explizit für nur Nächstnachbar-Kopplung und verschwindendes Magnetfeld aufgeführt. Übernächstnachbar-Terme ergeben die gleichen Ergebnisse mit der entsprechenden Ersetzung der Indizes.

Es wurden zwei Methoden zur Berechnung von $\chi(T)$ verwendet. Zum einen ein Lanczos-Algorithmus und zum anderen der Momente-Algorithmus, mit dem die Koeffizienten in der Entwicklung der Exponentialfunktion in Gleichung 3.9 direkt berechnet werden.
Der Lanczos-Algorithmus zeichnet sich dadurch aus, daß er die Hochdimensionalität von $\mathfrak{F}_{\mathbf{H}}$ stark reduziert. Allgemein dient der Lanczos-Algorithmus dazu, Matrizen in Tridiagonalgestalt zu überführen. Dadurch sind die Berechnungen nach Durchführen dieses Algorithmus weniger aufwendig als im ursprünglichen Problem.
Die zweite Methode der direkten Berechnung der Koeffizienten, bei der keine Verringerung der Dimensionalität des Hilbertraumes herbeigeführt wird, erweist sich als vorteilhafter bezüglich Laufzeit und Speicherbedarf, da letztendlich nur Polynome und keine rationalen Funktionen auftreten.

3.1.1 Lanczos-Algorithmus und Ergebnisse

Ziel des Lanczos-Algorithmus ist es, über das aus der Linearen Algebra bekannte Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungverfahren das hochdimensionale Eigenwertproblem für $\mathbf{H}$ auf ein niedrigdimensionales zurückzuführen, das mit Standardroutinen gelöst werden kann. Will man das System exakt lösen, so ändert sich die Dimensionalität nicht. Dies soll hier aber nicht das Ziel sein. Hier soll versucht werden $\mathbf{H}$ über den Lanczos-Algorithmus bis zur benötigten Ordnung in eine möglichst einfache Gestalt zu überführen, um die weiteren Berechnungen zu erleichtern. Der Algorithmus ist durch eine dreigliedrige Rekursionsvorschrift gekennzeichnet, mit deren Hilfe n Vektoren $|q_i\rangle$ $(i = 1 \ldots n)$ der Dimension m sukzessiv konstruiert werden[2]. Sei $|q_0\rangle$ der Nullvektor, $b_1 = 1$ und $|q_1\rangle$ ein Startvektor, der ein Zufallsvektor, aber kein Eigenvektor von $\mathbf{H}$ sein darf. Dann lautet die Konstruktionsvorschrift für den Vektor $|q_{i+1}\rangle$, sowie für die Skalare a_i und b_{i+1}

$$\begin{aligned} a_i &= \langle q_i|\mathbf{H}|q_i\rangle \ , \\ b_{i+1}^2 &= \frac{\langle q_{i+1}|q_{i+1}\rangle}{\langle q_i|q_i\rangle} \ , \\ q_{i+1} &= \mathbf{H}q_i - \frac{a_i}{\langle q_i|q_i\rangle}q_i - b_i^2 q_{i-1} \ . \end{aligned} \tag{3.10}$$

Die auf diese Weise konstruierten Vektoren $|q_i\rangle$ sind paarweise orthogonal, wie man mit vollständiger Induktion zeigen kann. Sie bilden eine Orthogonalbasis des Krylovraumes $K_n(|q_1\rangle, \mathbf{H})$ zum Startvektor $|q_1\rangle$, der von den Vektoren $\{|q_1\rangle, \mathbf{H}|q_1\rangle, \mathbf{H}^2|q_1\rangle, \ldots, \mathbf{H}^{n-1}|q_1\rangle\}$ aufgespannt wird. Das Verfahren bricht ab, wenn für einen Index j die Gleichung $b_j = 0$ erfüllt ist.

[2] Im weiteren wird hier die Bezeichnung aus der Linearen Algebra übernommen. Dies kann man mit der Analogie Vektorraum - Hilbertraum rechtfertigen.

Der Algorithmus produziert die Matrixeinträge a_i und b_i einer reellen, symmetrischen $n \times n$ Matrix $\mathbf{T}$ mit Tridiagonalgestalt, die gerade die Matrix $\mathbf{H}$ in der neuen normierten (!) Basis darstellt

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & & & \\ b_2 & a_2 & b_3 & & 0 \\ & b_3 & a_3 & b_4 & \\ & & b_4 & a_4 & \ddots \\ & 0 & & \ddots & \ddots \\ & & & & \end{pmatrix} . \tag{3.11}$$

Somit wurde die Dimensionalität von $\mathbf{H}$ stark reduziert. Geht man vom Heisenbergoperator 2.1 mit nur Nächstnachbar-Wechselwirkung aus, der auf eine Kette mit N Plätzen wirkt, so kann man korrekte Ergebnisse bis zur $N-1$-ten Ordnung erreichen, da dann gerade das größte zusammenhängende Cluster noch enthalten ist. Dies entspricht N Rekursionsschritten. Dadurch wird die ursprüngliche Dimension von 2^{2N} auf die Dimension N verringert. Für eine Beispielkette mit 10 Plätzen wird die Dimension bei der Berechnung der 9. Ordnung um einen Faktor 10^5 verringert.

Um diesen Algorithmus auf das vorliegende Problem anwenden zu können, muß man geeignete Startvektoren bzw. Startzustände wählen, jeweils für den Nenner und für den Zähler aus Gleichung 3.9. Für den Nenner ist das der Singulettproduktzustand $|S\rangle$ und für den Zähler der Zustand $M|S\rangle = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i^z|S\rangle$. Dies ist für den Zähler möglich, da man M an $e^{-\beta\mathbf{H}}$ vorbeiziehen darf mit $\langle S|M^2 e^{-\beta\mathbf{H}}|S\rangle = \langle S|Me^{-\beta\mathbf{H}}M|S\rangle$, weil $\sum_{i=1}^{N}[\mathbf{S}_j\mathbf{S}_{j+1}, \mathbf{S}_i^z] = 0$ gilt (Diese Kommutatorrelation bleibt natürlich auch für den übernächsten Nachbar-Term $\mathbf{S}_j\mathbf{S}_{j+2}$ gültig, da solche Skalarprodukte mit jeder Spinkomponente vertauschen).

Dadurch kann man den Nenner in Gleichung 3.9

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp}(e^{-\beta\mathbf{H}}) &= \langle S|e^{-\beta\mathbf{H}}|S\rangle \\ &= \left[e^{-\beta\mathbf{T}}\right]_{1,1} \\ &= 1 - \beta\mathbf{T}_{1,1} + \frac{1}{2!}\beta^2\left[\mathbf{T}^2\right]_{1,1} - \frac{1}{3!}\beta^3\left[\mathbf{T}^3\right]_{1,1} + \mathfrak{O}(\beta^4) \end{aligned} \tag{3.12}$$

mit Hilfe der Matrix $\mathbf{T}$ aus Gleichung 3.11 darstellen. Es ist klar, daß man nur den $[1,1]$-Eintrag benötigt, da dieser gerade dem Erwartungswert bezüglich des „ersten“ Einheitsvektors in der neuen Basis entspricht. Der Einheitsvektor ist gerade der entsprechende Startzustand, im vorliegenden Fall also der normierte Singulettproduktzustand. Für den Zähler ist die Entwicklung analog, wobei noch der Startzustand $M|S\rangle$ normiert werden muß.

3.1.2 Implementierung

Wie läßt sich nun dieser Algorithmus am effizientesten in einem Computerprogramm implementieren? Dazu ist es wichtig, sich darüber klar zu werden, welche Strukturen man benötigt, und wie man diese kodiert. Die Hauptstruktur sind in erster Linie die Basiszustände des physikalischen Systems. Da man davon ausgehen kann, daß man sehr viele davon benötigt, sollten diese im Speicherbedarf möglichst effizient behandelt werden.

Auf der anderen Seite werden mit diesen Basiszuständen alle Rechnungen durchgeführt, so daß der Zugriff darauf möglichst schnell sein sollte. Am besten dafür geeignet sind `integer`-Variablen, da diese sehr systemnah und die Rechnungen damit sehr schnell sind. Das Hauptproblem besteht in der Kodierung der Basiszustände. Jeder Kettenplatz kann durch die Platzverdoppelung vier Zustände annehmen, den Singulettzustand und die drei Triplettzustände. Diese Bezeichnung ist jedoch nur formal, da die Zustände Kombinationen von Spins aus der realen Kette und aus der virtuellen Kette sind. In Anhang A ist die Wirkung des Hamiltonoperators auf benachbarte Kettenplätze in einer Matrix zusammengefaßt. Die Wirkung auf die übernächsten Nachbarn ist analog. Bei einer bitweisen Kodierung für eine Kette mit N Plätzen benötigt man dafür 2N Bits, d.h. für jedes Platzpaar 2 Bits. Schon bei einer Kette mit nur 16 Plätzen gelangt man an die Grenze der natürlichen Wortlänge der benutzten Rechner von 4 Byte.

Die unfrustrierte Kette läßt sich damit bis in die 15. Ordnung korrekt entwickeln. Schließt man jedoch Frustration mit ein, so reicht es nur noch bis zur 7. Ordnung, da durch die Übernächstnachbar-Wechselwirkung Cluster der doppelten Länge im Vergleich zu Nächstnachbar-Wechselwirkung entstehen. Zur korrekten Beschreibung darf das größte zusammenhängende Cluster nicht größer als die Kettenlänge sein. In der vorliegenden Arbeit sollen Ergebnisse für die unfrustrierte Kette bis zur 16. Ordnung und für die frustrierte Kette bis zur 10. Ordnung erreicht werden. Dies bedeutet für die frustrierte Kette, daß man mindestens 20 Plätze benötigt, um bis auf finite-size Effekte korrekte Ergebnisse zu berechnen.

Auf den verwendeten Unix Plattformen gibt es die „`long long`“ Variablentypen, wodurch ein `long long int` 8 Byte groß ist. Diese sind ausreichend für die Kodierung der Zustände einer Kette mit 32 Plätzen, was für die Zwecke der vorliegenden Arbeit ausreicht. Zur Kodierung der Zustände $|q_i\rangle$ aus Gleichung 3.10 wurde eine einfach verkettete Liste angelegt, wobei die einzelnen Listenelemente die Basiszustände des entstehenden Krylovraumes darstellen. Die einzelnen Listenelemente werden durch die Struktur `Basiszustand` dargestellt (siehe Abbildung 3.2). Für den Vorfaktor sind ebenfalls `long long int`-Variablen nötig, da diese Zahlen im Laufe der Anwendung von $\mathbf{H}$ sehr schnell die 4 Byte-Größe übersteigen. Es handelt sich um rationale Vorfaktoren, so daß Zähler und Nenner getrennt gespeichert werden müssen. Um die Vorfaktoren so klein wie möglich zu halten, werden sie durch einen Euklid-Algorithmus immer wieder so weit wie möglich gekürzt.

```
struct Basiszustand {
long long int           vorfaktor_z
long long int           vorfaktor_n
unsigned long long int       vektor
Basiszustand*                 right
}
```

Abbildung 3.2: Struktur der Basiszustände

Die Implementierung des Lanczos-Algorithmus erfordert, daß man immer zwei Zustände im Speicher behält ($|q_i\rangle$ und $|q_{i-1}\rangle$), während der neue Zustand ($|q_{i+1}\rangle$) erzeugt wird, wie aus Gleichung 3.10 ersichtlich ist. Der Hauptteil des Programms ist die Implementierung der Wirkung des Hamiltonoperators, d.h. der Wirkung eines Spinproduktes $\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_{i+1}$ auf einen Basiszustand. Dabei handelt es sich um eine einfache Matrix-Vektor-Multiplikation, wobei die Matrix in diesem Fall sehr dünn besetzt ist. Die Anwendung des Hamiltonoperators auf diese Basiszustände erfolgt durch `switch`-Anweisungen, in denen an eine neue Liste neue Basiszustände angehängt und an diesen entsprechende Bitmanipulationen vorgenommen werden, um die neu entstehenden Basiszustände darzustellen. Die `switch`-Anweisung ist sehr schnell und steht im Innern einer Schleife, in der alle Basiszustände abgearbeitet werden.

Der Lanczos-Algorithmus erfordert für jeden Rekursionsschritt drei Vektor-Vektor-Multiplikationen (Skalarprodukte) und eine Matrix-Vektor-Multiplikation, die durch die verwendeten Algorithmen und Kodierungen recht schnell sind. Das Hauptproblem liegt im Speicherbedarf der entstehenden Zustände. Da sich die Anzahl der Basiszustände pro generiertem Zustand $|q_i\rangle$ anfangs ungefähr um den Faktor $3N$ erhöht und sich bei den hier benutzten Kettenlängen bei höheren Ordnungen ungefähr bei einem Faktor 5 pro Rekursionsschritt einpendelt, müssen sehr viele Basiszustände im Speicher gehalten werden. Es sind also ständig drei Listen, die den drei Zuständen $|q_{i-1}\rangle$, $|q_i\rangle$ und $|q_{i+1}\rangle$ aus Gleichung 3.10 entsprechen, im Speicher zu halten.

Eine einfache Rechnung zeigt den Speicherbedarf zur Berechnung der 8. Ordnung für eine Kette mit $N = 16$ Plätzen. Ausgehend von einem Startzustand, der nur aus einem Basiszustand besteht und in einer Struktur mit 28 Byte kodiert ist, benötigt man ca. 250 MB RAM, um den zuletzt entwickelten Zustand im Speicher zu halten. Bei diesen Größenordnungen benötigen auch die Berechnungen mehr Zeit, da viele Basiszustände abgearbeitet werden müssen. Diese Überschlagsrechnung gilt für die Berechnung des Nenners in Gleichung 3.9. Bei der Berechnung des Zählers in dieser Gleichung startet man mit dem Zustand $M|S\rangle$, der durch die Anwendung von M auf $|S\rangle$ aus N Basiszuständen besteht. Somit vervielfacht sich noch einmal der Speicherbedarf gegenüber dem Nenner.

Diese Überlegungen zeigen den enormen Speicherbedarf, den man schon für niedrige Ordnungen benötigt, um die Suszeptibilität der unfrustrierten Kette zu bestimmen. Will man nun noch Frustration (Übernächstnachbar-Kopplung) mit hinzunehmen, so verdoppelt sich der Rechenaufwand, da nun die Hauptroutine mit der Anwendung der Spinprodukte auf Basiszustände zweimal durchgeführt werden muß. Der Speicheraufwand steigt auch immens an, da man in den Strukturen die Vorfaktoren aus rationalen Zahlen durch rationale Funktionen in α ersetzen muß, weil der Frustrationsparameter α in allen Potenzen bis zur entwickelten Ordnung in β auftreten kann (Gleichung 3.10). Ein Vergleich mit der Überschlagsrechnung zeigt, daß man mit dieser Methode sehr schnell an die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechner stößt. Ein anderes wichtiges Merkmal dieser Methode ist, daß der Lanczos-Algorithmus Matrixeinträge a_i und b_i aus Gleichung 3.10 produziert, die in ihrer Primfaktorzerlegung sehr große Primzahlen aufweisen und somit nicht mehr gekürzt werden können. Dabei besteht die Gefahr, daß diese Zahlen den zulässigen Wertebereich eines `long long int` schon bei niedrigen Ordnungen übersteigen.
Diese Probleme führen zu der einfacheren Methode des Momente-Algorithmus. Hier werden die Koeffizienten der Entwicklung der Exponentialfunktion direkt berechnet. Diese Methode ist an das vorliegende Problem besser angepaßt. Der Speicherbedarf ist geringer, die Größe der entstehenden Faktoren läßt sich im voraus abschätzen, so daß ein „Überlaufen“ der entstehenden Zahlen nicht möglich ist und die Vorfaktoren bei den Berechnungen der frustrierten Kette sind keine rationalen Funktionen, sondern Polynome in α.
Um die Ergebnisse aus beiden Methoden vergleichen zu können, wird hier die höchste erreichte Ordnung der Suszeptibilität angegeben. Mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus war eine Auswertung der Suszeptibilität bis zur 9. Ordnung möglich. Dabei sind die Konstanten J und k_B aus Gründen der besseren Lesbarkeit hier und im weiteren auf eins gesetzt.

Suszeptibilität bis zur 9. Ordnung (unfrustriert)
über Lanczos-Algorithmus

$$\begin{aligned}\chi(T) &= \frac{1}{4}\frac{1}{T} - \frac{1}{8}\frac{1}{T^2} + \frac{1}{96}\frac{1}{T^4} \\ &+ \frac{5}{1536}\frac{1}{T^5} - \frac{7}{5120}\frac{1}{T^6} - \frac{133}{122880}\frac{1}{T^7} \\ &+ \frac{1}{16128}\frac{1}{T^8} + \frac{1269}{4587520}\frac{1}{T^9}\end{aligned} \tag{3.13}$$

Durch Berechnungen mit verschiedenen Ordnungen und Kettenlängen kann man zeigen, daß die Ergebnisse wirklich unabhängig von der betrachteten Systemgröße sind. Die Koeffizienten des Polynoms für die Suszeptibilität ändern sich nicht mehr für Berechnungen mit unterschiedlichen Kettenlängen. Ein Vergleich mit Anhang B zeigt die exakte Übereinstimmung der Koeffizienten der Entwicklung der Suszeptibilität, die mit Hilfe des Theorems zusammenhängender Cluster

berechnet wurde. Diese Ergebnisse belegen die sehr gute Funktionsweise unseres Modells.

3.1.3 Momente-Algorithmus

Die nachfolgend beschriebene Methode ist auf das vorliegende Problem der Hochtemperaturentwicklung zugeschnitten, so daß damit die Berechnungen effizienter als mit dem Lanczos-Algorithmus durchgeführt werden können. Es liegen Ergebnisse sowohl für die unfrustrierte als auch für die frustrierte Kette vor.
Die Methode der direkten Berechnung der Koeffizienten beinhaltet die Taylorentwicklung der Exponentialfunktion. Es entstehen Potenzen des Hamiltonoperators, für die die Erwartungswerte bezüglich des Startzustandes bestimmt werden müssen. Der Startzustand ist $|S\rangle$ für den Nenner und $|MS\rangle$ für den Zähler in Gleichung 3.9:

$$\begin{aligned}\langle e^{-\beta \mathbf{H}}\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\langle(-\beta\mathbf{H})^n\rangle \\ &= 1 - \langle\mathbf{H}\rangle\frac{1}{1!}\frac{1}{T} + \langle\mathbf{H}^2\rangle\frac{1}{2!}\frac{1}{T^2} - \langle\mathbf{H}^3\rangle\frac{1}{3!}\frac{1}{T^3} + \cdots \qquad (3.14)\end{aligned}$$

Die Basiszustände und die Wirkung des Hamiltonoperators werden wie beim Lanczos-Algorithmus implementiert. Hier bestehen die Listen nun aus den Basiszuständen, die durch die Wirkung von $\mathbf{H}$, $\mathbf{H}^2$,... entstehen. Um die Erwartungswerte von $\mathbf{H}^{2n}$ und $\mathbf{H}^{2n+1}$ $(n \in \mathbb{N})$ bestimmen zu können, benötigt man die zwei Zustände, $\mathbf{H}^n|S\rangle$ und $\mathbf{H}^{n+1}|S\rangle$

$$\begin{aligned}\langle S|\mathbf{H}^{2n}|S\rangle &= (\mathbf{H}^n|S\rangle)^2 \\ \langle S|\mathbf{H}^{2n+1}|S\rangle &= (\mathbf{H}^n|S\rangle)\cdot\left(\mathbf{H}^{n+1}|S\rangle\right) \ . \qquad (3.15)\end{aligned}$$

Die Erwartungswerte bezüglich $M|S\rangle$ werden in gleicher Weise berechnet. Hier wird die Hermitizität von $\mathbf{H}$ ausgenutzt. Um also die $2n$-te Ordnung der Entwicklung bestimmen zu können, reicht es aus, $\mathbf{H}^n|S\rangle$ zu berechnen. Durch diese Art der Berechnung genügt es hier, nur zwei Zustände, kodiert in zwei Listen, im Speicher zu halten. Im Vergleich dazu benötigt der Lanczos-Algorithmus drei Zustände bzw. Listen. Ein weiterer Vorteil dieser Methode besteht darin, daß man pro Entwicklungsschritt nur noch eine Matrix-Vektor-Multiplikation und eine Vektor-Vektor-Multiplikation durchführen muß. Dies bedeutet im Vergleich zum Lanczos-Algorithmus erheblich weniger Laufzeit und auch weniger Manipulationen an den Listen. Auch hat man hier bei den Berechnungen zur frustrierten Kette keine rationalen Funktionen als Vorfaktoren der Basiszustände, sondern Polynome in α. Sowohl die Koeffizienten dieser Polynome, als auch die Koeffizienten der Entwicklung der unfrustrierten Kette lassen sich in ihrer Größe besser abschätzen. Diese erreichen nicht so hohe Zahlen wie dies beim Lanczos-Algorithmus der Fall ist.

3.1.4 Implementierung

Aus der Ähnlichkeit der neuen Algorithmusstruktur und der Struktur des Lanczos-Algorithmus ist es recht einfach, das Problem auf dem Rechner zu implementieren. Hier wurde mit der Programmiersprache „C++“ gearbeitet. Mit dieser Sprache ist es möglich, Operatoren wie * (Multiplikation) oder + (Addition) neu zu definieren, so daß während der Laufzeit des Programms erkannt wird, welche Operationen konkret für die verknüpften Variablen durchgeführt werden müssen. Es ist somit der gleiche Operator, der `integer`-Variablen wie auch z.B. Polynome verknüpft. Man nennt diese Eigenschaft das Überladen von Operatoren.
Somit konnte mit einigen Unterprogrammen aus dem Lanczos-Algorithmus nach kleinen Modifikationen weitergearbeitet werden. Es wird hauptsächlich die Programmstrukur zur Berechnung der frustrierten Kette vorgestellt, da hier die Hauptprobleme in Laufzeit und Speicherbedarf liegen.
Zwei Klassen sind entscheidend. Zum einen die Klasse der Basiszustände (Abbildung 3.3) und zum anderen die Klasse der Vorfaktoren (Abbildung 3.4). Zur

```
class Basiszustand {
Polynom*                    vorfaktor
unsigned long long int         vektor
Basiszustand*                   right
}
```

Abbildung 3.3: Klasse der Basiszustände

Berechnung der frustrierten Kette muß man die Übernächstnachbar-Wechselwirkung getrennt von der Nächstnachbar-Wechselwirkung berechnen und abspeichern. Dazu reicht es nicht mehr aus, Brüche als Vorfaktoren zu verwenden, sondern man benötigt Polynome in α nach Gleichung 2.1. Da die Polynome vom Grad der berechneten Ordnung in β sind und die Koeffizienten ähnlich wie beim Lanczos-Algorithmus sehr schnell sehr groß werden, d.h. im Zähler und im Nenner stehen große Zahlen, ist der Speicherbedarf sehr viel größer als bei der Berechnung der unfrustrierten Kette.
Um den Speicherbedarf soweit wie möglich einzuschränken, wurde an einigen Stellen optimiert. Da bei jeder Anwendung von $\mathbf{H}$ der Faktor $1/4$ hinzukommt, kann dieser auch nachträglich in die Berechnungen eingefügt werden, und man benötigt nur noch ganze Zahlen als Koeffizienten der Polynome. Leider hat dies auch einen Nachteil, da nun Zweierpotenzen nicht mehr gekürzt werden können, so daß die Koeffizienten sehr groß werden. Der Variablentyp `long long int` (Darstellung bis ca. 10^{19}) reichte jedoch aus, um die unfrustrierte Kette bis zur 16. Ordnung zu berechnen. Um noch höhere Ordnungen zu erreichen, müßte man sich einen anderen Variablentyp überlegen, der folglich auch mehr Speicher benötigen würde und somit das Problem des Speicherbedarfs zusätzlich zur

```
class Polynom {
int                ord
long long int*    coef
}
```

Abbildung 3.4: Klasse der Vorfaktoren (Polynome)

höheren Ordnung nochmals vervielfachen würde. Es war leider nicht möglich, auf bereits existierende Klassen-Pakete zur Darstellung beliebig großer `integer`-Zahlen zurückzugreifen, da diese zuviel Speicher benötigten.

Um unabhängig von der berechneten Ordnung die Klasse `Polynom` als Vorfaktoren verwenden zu können, haben diese eine dynamische, anpassbare Ordnung. Dadurch wird gleichzeitig der Speicheraufwand optimiert. Ist der Koeffizient der höchsten Ordnung Null, so wird das Polynom um einen Grad erniedrigt, und man spart sich den Speicher dieses Koeffizienten. Um die Anzahl der Basiszustände auf ein Minimum zu reduzieren, werden gleiche Basiszustände zusammengefaßt und diejenigen mit Vorfaktor Null gelöscht. Dazu wird unter anderem der `quicksort`-Algorithmus verwendet, um die Basiszustände zu sortieren. Dies verkürzt auch die Berechnung der Skalarprodukte von einer Laufzeit $\propto N^2$ zu $\propto N$ (N Anzahl Listenelemente). Aus Speichergründen muß man beim Generieren des neuen Zustandes alle 10^6 generierte Basiszustände sortieren, zusammenfassen und gegebenenfalls löschen. Damit wird zum einen nicht zuviel Speicher auf einmal allokiert und zum anderen kann freigewordener Speicher wieder genutzt werden. Dadurch wird die Laufzeit des `quicksort`-Algorithmus an seine obere Grenze von $\propto N^2$ für das Sortieren von fast sortierten Listen gebracht. Dies ist leider unumgänglich. Eine weitere Optimierung würde hier der `heapsort`-Algorithmus liefern.

Mit diesen Optimierungen kann die Suszeptibilität für die unfrustrierte Kette problemlos berechnet werden. Das Gleiche gilt für den Nenner in Gleichung 3.9 der frustrierten Kette. Das einzige Problem besteht nun noch im Speicherbedarf der Berechnung des Zählers in Gleichung 3.9 für die frustrierte Kette. Im Vergleich zur Berechnung des Nenners bildet man für den Zähler Erwartungswerte bezüglich eines Zustandes, der nicht mehr nur aus einem Basiszustand, sondern durch die Anwendung der Magnetisierung M aus N (Anzahl der Kettenplätze) Basiszuständen besteht. Im aufwendigsten Fall benötigt man N mal soviel Speicher wie bei der Berechnung des Nenners.

Das Speicherproblem wird bei der Berechnung der höchsten Ordnung relevant. Um dieses Problem zu vermeiden, wurde auch ein anderer Weg eingeschlagen, die Erwartungswerte zu berechnen. Aufgrund der Translationsinvarianz der Ope-

ratoren im vorliegenden Problem gilt

$$\langle M^2 \mathbf{H}^n \rangle \quad = \quad N \langle \mathbf{S}_1^z \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i^z \mathbf{H}^n \rangle \ . \tag{3.16}$$

Dadurch erspart man sich die Berechnung der Doppelsumme. Da man in der Spur die Operatoren zyklisch vertauschen darf, wurde zuerst der Hamiltonoperator auf den Singulettproduktzustand angewandt und erst danach die Magnetisierung miteingebaut. Dadurch sieht die Rechnung für einen Erwartungswert aus der Entwicklung wie folgt aus

$$\langle S|M\mathbf{H}^{2n}M|S\rangle = (\langle S|\mathbf{H}^n \mathbf{S}_1^z) \cdot \left(\sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i^z \mathbf{H}^n |S\rangle \right) \ . \tag{3.17}$$

Analog lassen sich natürlich die Erwartungswerte für ungerade Potenzen von $\mathbf{H}$ berechnen. Der Vorteil besteht darin, daß man nicht die Listen mit $\mathbf{H}^n$ angewandt auf $M|S\rangle$, sondern nur angewandt auf $|S\rangle$, im Speicher behalten muß. Dies entspricht dem Speicheraufwand zur Berechnung des Nenners in Gleichung 3.9. Um nun die Magnetisierung einzubauen, speichert man die Listen $\mathbf{H}^n$ und $\mathbf{H}^{n+1}$ auf Festplatte ab, wendet $\hat{S}_1^z$ bzw. $\sum_{i=1}^{N} \hat{S}_i^z$ auf diese Listen an und bildet die Skalarprodukte. Am Ende löscht man die veränderten Listen und lädt die auf Festplatte gespeicherten Listen wieder in den Arbeitsspeicher. Nun kann man zur nächsten Ordnung gehen, indem man wieder $\mathbf{H}$ auf diese Listen anwendet. Um den Festplattenplatz so gering wie möglich zu halten und dadurch auch die Zugriffszeit so kurz wie möglich, wurden die Listenelemete binär abgespeichert. Diese Methode der Berechnung des Zählers erlaubt vorteilhafterweise Zähler und Nenner in einem Programm berechnen zu lassen, was die Gesamtlaufzeit in etwa halbiert, da die Listen nur einmal generiert werden müssen.

Die Berechnungen wurden alle auf einer `SUN Ultra Enterprise 10000` am Regionalen Rechenzentrum Köln durchgeführt. Diese Plattform stellt pro Prozeß 3840 MB Arbeitspeicher zur Verfügung. Dieser wurde für die Berechnungen der höchsten Ordnung der frustrierten Kette auch vollständig ausgenutzt bei einer Laufzeit von ungefähr 10 Tagen. In der höchsten entwickelten Ordnung benötigt man rund 60 Millionen Basiszustände um den entsprechenden Zustand darzustellen. Veranschlagt man im Schnitt 50 bytes pro Listenelement, das einen Basiszustand mit Vorfaktor repräsentiert, so gelangt man schon auf einen Speicherbedarf von 3 GB.
Die Richtigkeit der Koeffizienten wird durch den Vergleich mit den Daten aus Anhang B bzw. selbstkonsistent geprüft. Der Vergleich mit DMRG (**D**ichte-**m**atrix-**R**enormierungs**g**ruppe) zeigt, wie weit man mit Hilfe der berechneten Koeffizienten physikalische Größen darstellen kann.
Für die unfrustrierte Kette liegen Ergebnisse bis einschließlich 16. Ordnung in β vor, d.h. 17 Koeffizienten. Da für die frustrierte Kette kein direkter Vergleich

mit vorhandenen Ergebnissen möglich war, konnte die Richtigkeit nur selbstkonsistent überprüft werden. Ein erster Test ist natürlich der Limes $\alpha = 0$, bei dem die Ergebnisse der frustrierten Kette in die Ergebnisse der unfrustrierten Kette übergehen müssen. Ein weiterer Test ist die Übereinstimmung des Absolutterms und des Terms der höchsten Ordnung in α für jede Ordnung in β. Die Berechnung der höchsten α-Ordnung für jede Ordnung in β, d.h. der Koeffizient von $\alpha^n\beta^n$, enspricht dem Fall, daß keine Nächstnachbar-Wechselwirkung in diesem Koeffizienten vorkommt. Es wird ein Term berechnet, der nur aus Übernächstnachbar-Kopplungen besteht. Dies enspricht zwei entkoppelter Ketten, die nur Nächstnachbar-Kopplung besitzen (Abbildung 3.5).

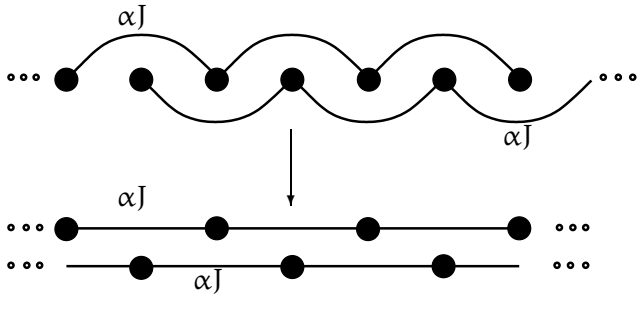


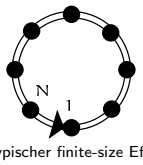
Abbildung 3.5: Bestimmung von Termen der Art $\alpha^n\beta^n$, bei welchen nur Übernächstnachbar-Wechselwirkung vorliegt $\rightarrow$ Betrachtung zweier entkoppelter Ketten

Da die Suszeptibilität pro Platz ausgerechnet wird, müssen die Ergebnisse übereinstimmen. Bei der frustrierten Kette gelang die Berechnung der Suszeptibilität bis zur 10. Ordnung in β. Die beiden Ergebnisse (Anhang C) wurden in der höchsten Ordnung korrigiert, da die Kettenlänge der höchsten berechneten Ordnung entsprach und somit finite-size Korrekturen nötig waren (Abschnitt 3.2). Allgemein sei festgehalten, daß die berechneten Größen tatsächlich unabhängig von der betrachteten Systemgröße sind. Durch Rechnungen mit verschiedenen Kettenlängen konnte gezeigt werden, daß die entstehenden Polynome exakt übereinstimmen. Dies stellt einerseits eine Überprüfung der Rechnungen und andererseits eine Bestätigung des Theorems zusammenhängender Cluster [15] dar.

3.2 Finite-size Korrekturen

Bei den Berechnungen von Zähler und Nenner in Gleichung 3.9 kommt es darauf an, den Speicher optimal zu nutzen. Um keine finite-size-Effekte zu erhalten, sollte das betrachtete System, d.h. die Kettenlänge möglichst groß sein. Dabei bedeuten finite-size Effekte hier, daß aufgrund der periodischen Randbedingungen in hohen Ordnungen der Entwicklung Erwartungswerte berechnet werden, die in dieser Ordnung eigentlich nicht auftreten dürfen. Bei einer Verlängerung der Kette verschwinden diese Effekte wieder. Da eine Verlängerung der

Kette bei den Berechnungen für die höchsten Ordnungen der Entwicklung aus Speichergründen nicht möglich war, mußten finite-size Effekte in Kauf genommen werden, die nachträglich explizit behoben wurden. Bei der Anwendung des Hamiltonoperators 2.1 mit nur Nächstnachbar-Wechselwirkung auf den Singulettproduktzustand sind jeweils benachbarte Kettenplätze betroffen, so daß Basiszustände entstehen, bei denen die größten entstehenden zusammenhängenden Cluster aus einem bond bestehen. Durch weiteres Anwenden des Hamiltonoperators kommt jeweils ein bond zum größten zusammenhängenden Cluster hinzu, d.h. alle Kettenplätze an diesen bonds sind der Wirkung von $\mathbf{H}$ ausgesetzt bzw. ausgesetzt worden.



typischer finite-size Effekt

Bei einer Kette mit N Plätzen gibt es $N-1$ bonds, wenn man die periodischen Randbedingungen nicht beachtet. Das bedeutet, daß man nur bis zur Ordnung $N-1$ entwickeln darf, ohne finite-size Effekte zu erhalten. Ein typischer finite-size Effekt ist das Umlaufen des größten zusammenhängenden Clusters aufgrund der periodischen Randbedingungen.

Entwickelt man nun bis zur N-ten Ordnung, so sind die größten entstehenden Cluster aufgrund der periodischen Randbedingungen in dieser Ordnung der Entwicklung nicht korrekt erfaßt. Im weiteren wird von einer Kette mit N Plätzen ausgegangen, die in der N-ten Ordnung entwickelt wird. Es werden die finite-size Effekte für den Zähler und den Nenner aus Gleichung 3.9 getrennt berechnet. Dabei wird zuerst nur die unfrustrierte Kette betrachtet, und danach werden die Ergebnisse auf die frustrierte Kette übertragen.

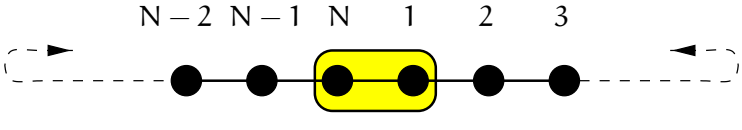


Abbildung 3.6: Ursache des finite-size-Effektes im Nenner von Gleichung 3.9

Für den Nenner in Gleichung 3.9 bedeutet dies, daß Erwartungswerte bzw. Spuren der Art

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{H}^N \rangle &= \cdots + \langle (\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2)(\mathbf{S}_2\mathbf{S}_3)\cdots(\mathbf{S}_N\mathbf{S}_1)\rangle \\ &= \cdots + \langle \mathbf{S}_1^2\mathbf{S}_2^2\cdots\mathbf{S}_N^2\rangle \end{aligned} \tag{3.18}$$

bei den Berechnungen miteingehen, obwohl diese nicht realisiert sind (scheamtische Darstellung in Abbildung 3.6). Dabei treten Spinprodukte der Art $\hat{S}^\sigma\hat{S}^{\sigma'}$ mit $\sigma \in (x,y,z)$ auf. Nur Beiträge mit $\sigma = \sigma'$ liefern Werte ungleich Null, da für Spinprodukte mit $\sigma \neq \sigma'$ die Erwartungswerte verschwinden ($\langle \cdots \hat{S}_i^\sigma \hat{S}_i^{\sigma'} \cdots \rangle = 0$). Es sind Terme mit $\left(\hat{S}^\sigma\right)^2 = 1/4$, die für eine Kette mit N Plätzen durch die drei Komponenten von σ einen Beitrag von $3\left(\frac{1}{4}\right)^N$ liefern. Durch N! Möglichkeiten der Anordnung der Faktoren $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}$ kommt man auf einen Faktor $N!\cdot 3\left(\frac{1}{4}\right)^N$, der im Nenner in der N-ten Ordnung zuviel berechnet

wurde. Alle anderen Terme, die aus Clustern einer kleineren Größe bestehen, sind korrekt erfaßt.

Die finite-size Effekte beim Zähler von Gleichung 3.9 sind nicht ganz so offensichtlich. Auch hier sind nur die größten entstehenden zusammenhängenden Cluster in der N-ten Ordnung für die Effekte verantwortlich. Es ergeben sich durch die Magnetisierung M drei Anteile, die betrachtet werden müssen. Als erstes ist es der Anteil der Art

$$\langle \hat{S}_1^z \mathbf{H}^N \hat{S}_1^z \rangle = \cdots + \langle \hat{S}_1^z \, (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) \, (\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3) \cdots (\mathbf{S}_N \mathbf{S}_1) \, \hat{S}_1^z \rangle \ , \tag{3.19}$$

der zuviel berechnet wird und einen Faktor von $N!3\left(\frac{1}{4}\right)^{N+1}$ produziert. Dabei ist die Begründung die gleiche wie für die finite-size Effekte des Zählers. Dafür fehlen Terme der Art

$$\langle \hat{S}_1^z \, (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2) \, (\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3) \cdots (\mathbf{S}_N \mathbf{S}_{N+1}) \, \hat{S}_{N+1}^z \rangle \ , \tag{3.20}$$

die nur für die z-Komponenten der Spins einen Beitrag liefern, da der Erwartungswert

$$\langle \hat{S}_1^z \cdots \left(\sum_{\sigma'} \hat{S}_1^{\sigma'} \hat{S}_2^{\sigma'} \right) \cdots \left(\sum_{\sigma} \hat{S}_N^{\sigma} \hat{S}_{N+1}^{\sigma} \right) \cdots \hat{S}_{N+1}^z \rangle \tag{3.21}$$

für $\sigma, \sigma' \neq z$ verschwindet. Durch Abzählen der Anordnungen der Spinproduktterme $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}$ und durch Vertauschen der Indizes der äußersten z-Komponenten der Spins aus der Magnetisierung M ist dies insgesamt ein Beitrag von $2N!\left(\frac{1}{4}\right)^{N+1}$, der in den Berechnungen fehlt.
Die periodischen Randbedingungen liefern noch weitere Terme, die in Abbildung 3.7 veranschaulicht sind. Es sind Terme, bei denen ein Kettenplatz in den Spinpro-

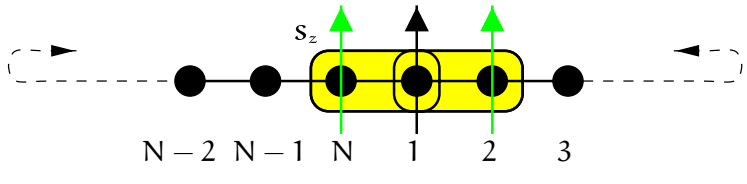


Abbildung 3.7: Anordnungen der $\hat{S}_z$ im Zähler von Gleichung 3.9, die finite-size Effekte bewirken.

dukten dreifach auftritt. Multipliziert man die Spinproduktterme $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}$ für diesen Fall aus, ergeben sich Beiträge

$$\hat{S}_1^z \hat{S}_1^x \hat{S}_1^y \cdot \hat{S}_i^x \hat{S}_i^y \hat{S}_i^z \ , \tag{3.22}$$

wobei $\hat{S}_1^z$ und $\hat{S}_i^z$ aus der Magnetisierung M stammen. Dabei treten nur diese Art von Produkten (x, y, z) auf, da nur diese einen Beitrag liefern aufgrund

von Gleichung 3.24. Durch die möglichen Anordnungen der x und y bleiben nur Terme übrig, bei denen der Platz i und Platz 1 direkt benachbart sind. Die restlichen Terme liefern aufgrund der zyklischen bzw. antizyklischen Vertauschung der xyz-Terme und deren Summation keinen Beitrag. Gerade wenn Platz i und Platz 1 benachbart sind, entstehen Summanden, die alle das gleiche Vorzeichen haben und somit einen Beitrag liefern.
Es ergeben sich insgesamt Beiträge der Art

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{S}_1^z \left(\mathbf{S}_N \mathbf{S}_1\right)\left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right)\left(\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3\right) \cdots \hat{S}_2^z \rangle \\
=&\langle \hat{S}_1^z \sum_{\sigma,\sigma'} \underline{\hat{S}_1^\sigma \left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right) \hat{S}_2^{\sigma'}} \hat{S}_N^\sigma \hat{S}_3^{\sigma'} \cdots \ \hat{S}_2^z \rangle \ , \\
&\langle \hat{S}_1^z \left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right)\left(\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3\right)\left(\mathbf{S}_N \mathbf{S}_1\right) \cdots \hat{S}_2^z \rangle \\
=&\langle \hat{S}_1^z \sum_{\sigma,\sigma'} \underline{\left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right) \hat{S}_1^\sigma \hat{S}_2^{\sigma'}} \hat{S}_N^\sigma \hat{S}_3^{\sigma'} \cdots \ \hat{S}_2^z \rangle \ , \\
&\langle \hat{S}_1^z \left(\mathbf{S}_N \mathbf{S}_1\right)\left(\mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3\right)\left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right) \cdots \hat{S}_2^z \rangle \\
=&\langle \hat{S}_1^z \sum_{\sigma,\sigma'} \underline{\hat{S}_1^\sigma \hat{S}_2^{\sigma'} \left(\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2\right)} \hat{S}_N^\sigma \hat{S}_3^{\sigma'} \cdots \ \hat{S}_2^z \rangle \ .
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Um den gesamten Faktor auszurechnen, den solche Terme liefern, benötigt man die Relation

$$\hat{S}^x \hat{S}^y = \frac{i}{2} \hat{S}^z \text{ und zyklisch.} \tag{3.24}$$

Bei antizyklischer Vertauschung erhält man das negative Ergebnis. Dadurch erhält man durch die unterstrichenen Teile aus Gleichung 3.23 nur Beiträge für $\sigma = \sigma' \in (x, y)$, deren Produkte z-Komponenten ergeben, so daß der Erwartungswert in 3.23 nicht verschwindet. Insgesamt ensteht ein Faktor von $-8/4^{N+1}$, der zum einen durch Vertauschen der x, y Anordnungen und zum anderen durch Ersetzen der aus der Magnetisierung M stammenden z-Komponente von $\hat{S}_2^z \to \hat{S}_N^z$ beiträgt. Durch Abzählen der auftretenden Anordnungen der in Gleichung 3.23 nicht explizit erwähnten $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}$ Spinproduktterme ergibt sich ein Faktor $N!/3!$. Beiträge mit anderen Summanden $\hat{S}_i^z$ mit $i \neq N, 1, 2$ aus der Magnetisierung M liefern keine Beiträge dieser Art.
Insgesamt summieren sich die Beiträge aus der letzten Betrachtung zu $-N! \cdot \left(\frac{1}{4}\right)^{N+1} \frac{4}{3}$.
Als Bilanz für den Zähler bleibt ein Faktor $N! \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{1}{4}\right)^{N+1}$, der hinzugefügt werden muß.
Zusammenfassend sind hier die Korrekturen für die Berechnung der N-ten Ordnung einer Kette mit N Plätzen angegeben

$$\begin{aligned}
\text{Zähler}_{\text{korrigiert}} &= \text{Zähler}_{\text{berechnet}} + N! \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{1}{4}\right)^{N+1} \\
\text{Nenner}_{\text{korrigiert}} &= \text{Nenner}_{\text{berechnet}} - N! \cdot 3 \left(\frac{1}{4}\right)^{N} \ .
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Die Korrekturen für die frustrierte Kette sind analog. Auch hier treten die finite-size Effekte erst in der Ordnung auf, die der betrachteten Kettenlänge entspricht. In diesem Fall sind dies Korrekturen, die nur die Terme mit Übernächstnachbar-Kopplung betreffen, da bei diesen Berechnungen bis zur N-ten Ordnung eine Kettenlänge von 2N-Plätzen verwendet wurde. Das sind somit die α-Terme mit der höchsten Potenz in der höchsten entwickelten Ordnung. In dieser Ordnung $\alpha^N \cdot \beta^N$ kann man sich dann das System aus zwei Ketten halber Länge vorstellen, bei denen die einzelnen Spins nur mit nächsten Nachbarn wechselwirken. Dies entspricht aber gerade den oben beschriebenen Korrekturen für die unfrustrierte Kette. Somit kann man die Ergebnisse pro Gitterplatz hier übernehmen.
Die finite-size Effekte für die N-ten Ordnung einer Kette mit N Plätzen sind somit noch recht gut überschaubar. Würde man eine Ordnung weiter entwickeln bei gleicher Kettenlänge, wären die finite-size Effekte zu komplex, als daß man sie noch zuverlässig korrigieren könnte.

4 Bestimmung der spezifischen Wärme und der Entropie

Bei den Berechnungen der Suszeptibilität wurde im Nenner von Gleichung 3.9 die großkanonische Zustandssumme berechnet. Aus dieser Zustandssumme lassen sich weitere thermodynamische Größen bestimmen. Hier wird im speziellen auf die spezifische Wärme $c(T)$ und die Entropie $s(T)$ pro Platz eingegangen. Diese Größen lassen sich direkt oder indirekt experimentell gut bestimmen und sind daher ebenfalls von Interesse.
Es wurde mit den Ergebnissen aus Anhang D für die Zustandssummen der unfrustrierten und der frustrierten Kette gearbeitet. Diese enthalten die im vorherigen Abschnitt erwähnten finite-size Korrekturen.

Bestimmung der spezifischen Wärme

Zur Bestimmung der spezifischen Wärme $c(T)$ wird der Nenner aus Gleichung 3.9 verwendet.

$$\begin{aligned} c(T) &= \frac{1}{N}\frac{\partial\langle \mathbf{H}\rangle}{\partial T} \\ &= -\frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\frac{\partial}{\partial\beta}\mathrm{Sp}(e^{-\beta\mathbf{H}})}{\mathrm{Sp}(e^{-\beta\mathbf{H}})}\right) \\ &= -\frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\frac{\partial}{\partial\beta}Z(\beta)}{Z(\beta)}\right) \end{aligned} \tag{4.1}$$

$Z(T)$ bzw. $Z_\alpha(T)$ sind die Zustandssummen, die in Anhang D explizit aufgeführt sind. Dabei wird wie bei der Berechnung der Suszeptibilität vorgegangen. Zähler und Nenner in obiger Gleichung wurden schon berechnet und nun wird diese

gebrochen rationale Funktion wiederum in eine Taylorreihe um $\beta = 0$ entwickelt, bevor sie nach T abgeleitet wird, so daß man als Ausdruck für die spezifische Wärme pro Platz ebenfalls ein Polynom erhält. Dieses wird hier nicht explizit angegeben, da es sich aus dem Vorhandenen schnell berechnen läßt. Wie man an den Gleichungen erkennt, muß auch die innere Energie $\langle \mathbf{H} \rangle$ zur Berechnung der spezifischen Wärme bestimmt werden. Auf diese wird jedoch nicht weiter eingegangen.

Bestimmung der Entropie

Zur Bestimmung der Entropie pro Platz wird das Ergebnis der spezifischen Wärme übernommen und die Kenntnis von $s(T = \infty) = \ln 2$ genutzt, so daß man folgende Gleichung erhält

$$\begin{aligned} s(T) &= -\int_T^\infty \frac{c(T')}{T'} dT' + s(\infty) \\ &= -\int_T^\infty \frac{c(T')}{T'} dT' + \ln 2 \ . \end{aligned} \tag{4.2}$$

Dabei ist im Limes $\beta = 0$ die Dimsion des Hilbertraumes für einen Platz auf der $S = 1/2$-Kette Zwei. Die spezifische Wärme, die Entropie und die Suszeptibilität liegen nun als Polynome vor. Trotz der hohen erreichten Ordnungen reichen diese Darstellungen noch nicht aus, um verläßliche Aussagen über das Verhalten dieser Größen bei Temperaturen im Bereich von $T \approx J/2$ oder tiefer machen zu können.

Die folgenden Abschnitte befassen sich mit verschiedenen Darstellungen, die allesamt versuchen, die Informationen aus diesen Polynomen so effizient wie möglich zu nutzen.

5 Verbesserte Darstellungen und Vergleiche

Die vorliegenden Polynome für $\chi(T)$, $c(T)$ und $s(T)$ nutzen die Informationen, mit Hilfe derer man sie erstellt hat, nicht so effizient wie andere Darstellungen. Aus diesem Grund werden in den folgenden Abschnitten andere Darstellungen vorgestellt und mit den bisherigen Ergebnissen verglichen.

Um noch bessere Aussagen über den Tieftemperaturbereich machen zu können, werden in den danach folgenden Abschnitten noch weitere Informationen in die Darstellungen eingebunden. Dies geschieht durch den Einbau von Parametern, die über diese Informationen bestimmt werden. Es handelt sich dabei um Informationen über allgemeine Eigenschaften der jeweiligen thermodynamischen Größe im Tieftemperaturbereich.

5.1 Kettenbruch-Darstellung

Bevor die Kettenbruchdarstellung explizit betrachtet wird, soll hier zunächst die Methode der Padé-Approximation vorgestellt werden. Die Padé-Approximation läßt sich aus der Kettenbruchdarstellung durch eine einfache Umrechnung des Kettenbruchs ableiten. Es handelt sich also um die gleiche Darstellung.

Die $F_{[L/M]}$ Padé-Approximation einer Funktion $F(z) = \sum_{n\geq 0} a_n z^n$ ist der Quotient zweier Polynome P_L und Q_M vom Grad L bzw. M

$$F_{[L/M]} = \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} = \frac{p_0 + p_1 z + \cdots + p_L z^L}{q_0 + q_1 z + \cdots + q_M z^M} \ , \tag{5.1}$$

wobei die Koeffizienten der Polynome so gewählt werden, daß die ersten $L + M + 1$ Koeffizienten der Entwicklung von $F(z)$ mit den Koeffizienten der Entwicklung von $F_{[L/M]}$ übereinstimmen. Die Wahl der Koeffizienten ist bis auf einen Faktor eindeutig. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann $q_0 = 1$ gewählt werden, so daß alle Koeffizienten eindeutig sind.
Die Voraussetzung zur Anwendung der Padé-Approximation ist ein glattes Verhalten der gesuchten Funktion. Die Padé-Approximation ist z.B. nicht geeignet, um kritische Parameter abzuschätzen. Allgemein kann man sagen, daß die Padé-Approximation versucht, eine analytische Fortsetzung der Funktion $F(z)$ auch außerhalb des Konvergenzradius der Reihe bereitzustellen. Durch Padé-Aproximationen genügend hoher Ordnung werden rationale Funktionen exakt repräsentiert, d.h. Funktionen, die nur endlich viele Pole besitzen. Durch Variieren der Ordnungen der Polynome in Zähler und Nenner kann man Kenntnisse über das erwartete Verhalten miteinbeziehen. Sei z.B. $F(x)$ eine reelle Funktion, von der man erwartet, daß sie für $x \to \infty$ verschwindet, so betrachtet man eine Padé-Approximation mit $M > L$. Dadurch ist automatisch gewährleistet, daß die Funktion im Limes $x \to \infty$ verschwindet.
Zusammenfassend bedeutet das für die im vorliegenden Fall berechneten Polynome, daß durch eine Padé-Approximation versucht wird, über die bisherigen, schon bekannten Terme einer Reihe die eigentliche Reihenentwicklung besser zu approximieren.
Um die Analogie zur Kettenbruchdarstellung abzuleiten, betrachtet man z.B. die Darstellung einer Funktion $f(x)$ als Kettenbruch der Tiefe 4, was bedeutet, daß in der folgenden Darstellung $2 \times 4 = 8$ Konstanten $c_0, \cdots, c_7$ bestimmt werden müssen

$$f[8] = \cfrac{c_0}{x + c_1 + \cfrac{c_2}{x + c_3 + \cfrac{c_4}{x + c_5 + \cfrac{c_6}{x + c_7}}}} \ . \tag{5.2}$$

Dabei ist die Bezeichnung des Kettenbruchs von der Anzahl der Koeffizienten abhängig. Im weiteren entspricht die Anzahl der Koeffizienten der Ordnung des Kettenbruches. Den Kettenbruch in obiger Gleichung bringt man auf den Hauptnenner

$$\frac{p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + p_3 x^3}{q_0 + q_1 x + q_2 x^2 + q_3 x^3 + q_4 x^4} \ , \tag{5.3}$$

wobei die Koeffizienten p_i und q_i durch die c_i bestimmt werden. Kürzt man durch die Ersetzungen $p_i \to p_i/q_0$ und $q_i \to q_i/q_0$ den Absolutterm im Nenner, so daß $q_0 = 1$ ist , erhält man die $f_{[3,4]}$-Padé-Approximation als äquivalente Darstellung.
Allgemein kann man festhalten, daß einem Kettenbruch der Tiefe N mit $2N$ Koeffizienten eine $[N-1/N]$-Padé-Approximation entspricht. In der weiteren Arbeit werden die Kettenbruchdarstellungen einer Funktion f wie in Gleichung 5.2 als $f[n]$ bezeichnet, wobei n die Anzahl der Koeffizienten im Kettenbruch ist. Durch diese Darstellung ist der Informationsgehalt des Kettenbruches eindeutig festgelegt.
Bei einer Bezeichnung über Padé-Darstellungen können sich unter Umständen Uneindeutigkeiten ergeben. Sei $g[5]$ die Kettenbruchdarstellung einer Funktion g in $\beta = 1/T$

$$g[5] = \cfrac{c_0}{\beta + c_1 + \cfrac{c_2}{\beta + \cfrac{c_3}{\beta + c_4}}} \ . \tag{5.4}$$

Dies entspricht einer $g_{[2/3]}$-Padé-Darstellung in β

$$\frac{c_0 \left(\beta^2 + \beta\, c_4 + c_3\right)}{\beta^3 + (c_4 + c_1)\, \beta^2 + (c_3 + c_1 c_4 + c_2)\, \beta + c_1 c_3 + c_4 c_2} \ , \tag{5.5}$$

oder einer $g_{[3/3]}$-Padé-Darstellung in T

$$\frac{c_0 T \left(1 + c_4 T + c_3 T^2\right)}{(c_1 c_3 + c_4 c_2)\, T^3 + (c_3 + c_1 c_4 + c_2)\, T^2 + (c_4 + c_1)\, T + 1} \ . \tag{5.6}$$

Dabei ist zu beachten, daß der Absolutterm p_0 im Zählerpolynom der Padé-Darstellung in T Null ist. Formal hat man eine höhere Ordnung in der Padé-Darstellung, aber in Wirklichkeit hat man genauso viele Informationen wie in der Padé-Darstellung in β. Der Grund für diese Betrachtung liegt in technischen Details der Darstellung der Polynome in β der berechneten Größen. Diese werden um den Hochtemperaturlimes $\beta = 0$ als Kettenbruch entwickelt und zur Darstellung in Kettenbrüche in T umgeschrieben.
Im folgenden wird die Vorgehensweise zur Darstellung der Suszeptibilität χ als Kettenbruch vorgestellt. Da die Ausdrücke für die Suszeptibilität als Polynome

in β vorliegen, werden diese als Kettenbrüche der Art

$$\chi[N](\beta) = \cfrac{\beta}{c_1 + \cfrac{\beta}{c_2 + \cfrac{\ddots}{\cdots + \cfrac{\beta}{c_N}}}} \tag{5.7}$$

umgeschrieben. Dies ist im Falle des kleinen Parameters β die übliche Darstellung. Man erkennt an obiger Gleichung, daß für gerades N die Suszeptibilität für $\beta \to \infty$, also $T \to 0$, einen endlichen Wert annimmt, wohingegen sie für ungerades N divergiert. Zur Darstellung der Suszeptibilität $\chi(T)$ werden die Kettenbrüche in β in Kettenbrüche in T umgeschrieben wie in Gleichung 5.2.
Der Vorteil gegenüber der Padé-Darstellung liegt in der Konstanz der Koeffizienten c_i. Sind diese einmal bestimmt, so verändern sie sich nicht mehr bei einer Kettenbruchdarstellung in höherer Ordnung. Somit lassen sich die Koeffizienten sukzessive bestimmen. Dieser Vorteil wird im weiteren ausgenutzt, um durch die Hinzunahme von weiteren Parametern das Tieftemperaturverhalten miteinbeziehen zu können (siehe Abschnitt 5.2). Damit z.B. das Curie-Gesetz erfüllt ist, muß in Gleichung 5.7 für alle Entwicklungen $c_1 = 4$ gelten und aus dem Curie-Weiss-Gesetz folgt $c_2 = 1/2$.

Im folgenden werden nun die Ergebnisse der Berechnungen in den verschiedenen Darstellungen vorgestellt. Dabei wird allgemein wie folgt vorgegangen. Die berechneten Polynome der entsprechenden thermodynamischen Größen werden über einen Kettenbruch dargestellt. Dabei spielt die Anzahl der Koeffizienten des Kettenbruches eine entscheidende Rolle. Als Faustregel kann man festhalten, daß ein Polynom P in N-ter Ordnung in Form der Koeffizienten $N+1$ Informationen enthält, so daß man dieses Polynom maximal als $P[N+1]$-Kettenbruch darstellen kann. Dabei geht man davon aus, daß das Polynom P den ersten $N+1$ Termen der Reihenentwicklung der realen Größe entspricht. Es soll nicht das Ziel sein, das Polynom in exakter Weise als Kettenbruch darzustellen. Mit Hilfe der Kettenbruchdarstellung werden nun die restlichen Terme der Entwicklung anhand der in P vorhandenen Terme approximiert.

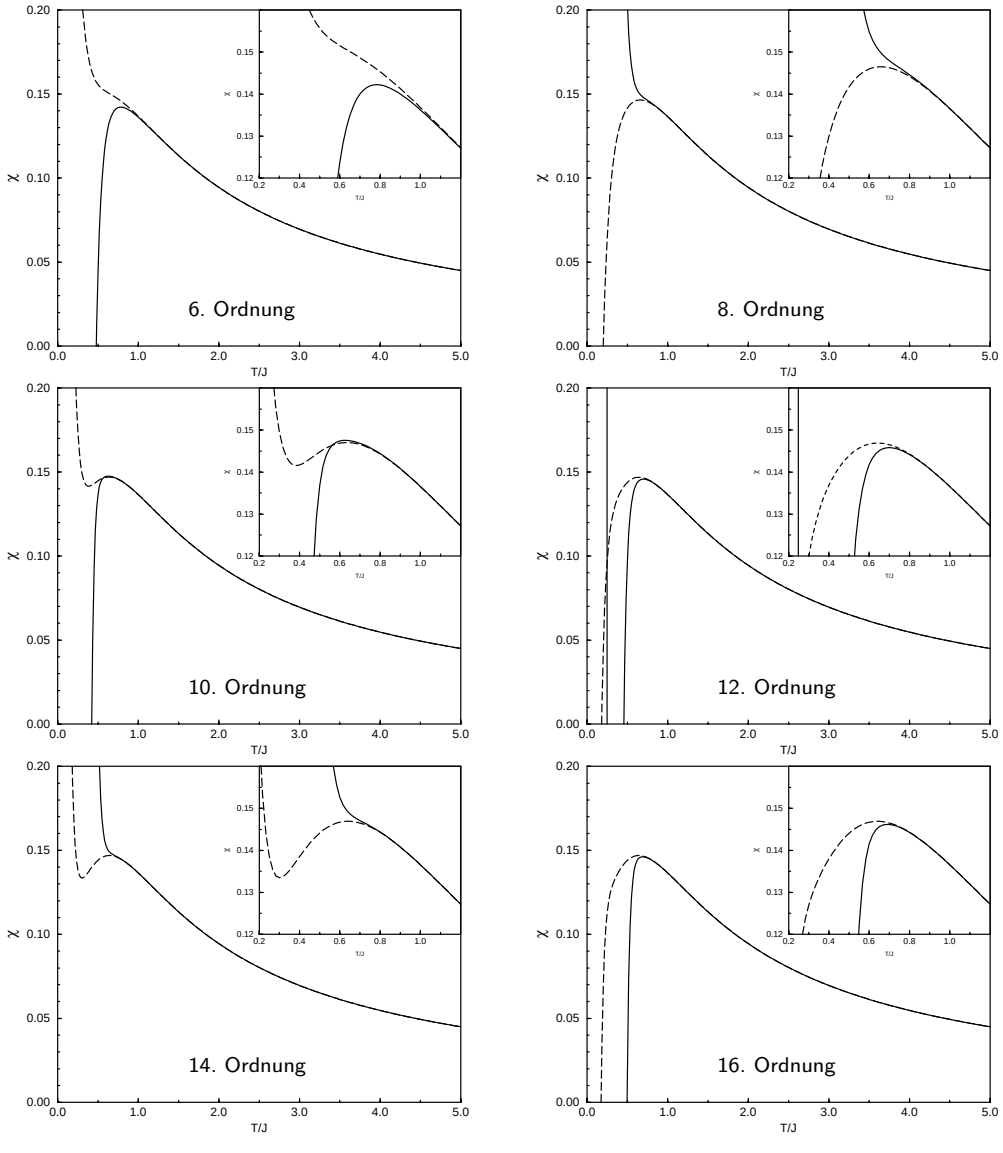


Abbildung 5.1: Verschiedene Ordnungen der Polynome der unfrustrierten Suszeptibilität χ (durchgezogene Linie) und der entsprechenden $\chi[n+1]$-Kettenbruchdarstellungen (gestrichelte Linie) gegenüber T/J. Dabei ist n die angegebene Ordnung.

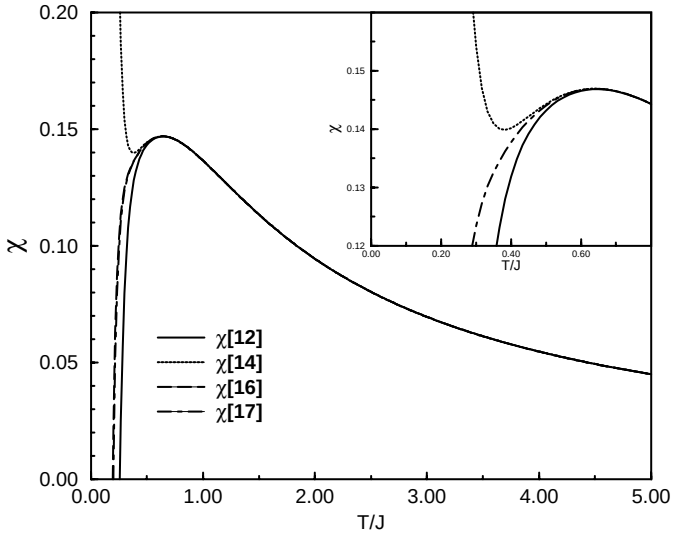


Abbildung 5.2: Verschiedene Kettenbruch-Darstellungen der Suszeptibilität χ in der 16. Ordnung. Es handelt sich jeweils um $\chi[n]$-Kettenbruchdarstellungen, wobei n der Anzahl der Koeffizienten entspricht.

In Abbildung 5.1 sind für verschiedene Ordnungen die Polynome und die entsprechenden Kettenbruchdarstellungen für die Suszeptibilität der unfrustrierten Kette gegenübergestellt. Dabei bedeutet hier n-te Ordnung, daß das Polynom χ bis zur n-ten Ordnung und die $\chi[n+1]$-Kettenbruchdarstellung abgebildet ist.

Im Hochtemperaturbereich für $T/J > 1$ stimmen alle Polynomdarstellungen überein. Dies ist nicht weiter erstaunlich, da gerade in diesem Bereich die Hochtemperaturentwicklung ihre Stärke hat. Der interessante Bereich befindet sich bei Temperaturen $T/J < 1$. Hier stellt man fest, daß für höher werdende Ordnungen die Polynomdarstellungen keinen weiteren Aufschluß über das Verhalten in diesem Temperaturbereich geben. Abhängig vom Vorzeichen des Koeffizienten der höchsten Ordnung des jeweiligen Polynoms in $1/T$, divergiert dieses für $T \to 0$ gegen $+\infty$ oder $-\infty$.

Bei den Kettenbruchdarstellungen zeigt sich ein anderes Verhalten. Hier erkennt man, daß sich für höher werdende Ordnung immer stärker ein Maximum in der Suszeptibilität ausprägt. Obwohl die Übereinstimmung der einzelnen Polynome bei ca. $T/J \approx 1$ aufhört und für tiefer werdende Temperaturen nicht mehr vorhanden ist, wird die Übereinstimmung der einzelnen Kettenbruchdarstellungen für höher werdende Ordnung besser. Auch die Kettenbruchdarstellungen divergieren für $T \to 0$. Wie man aus den Grafiken erkennt, divergieren die Kettenbruchdarstellungen für $T \to 0$ gegen $+\infty$ oder $-\infty$. Es ist keine Systematik zu erkennen, wie die Darstellungen in Abhängigkeit der Ordnung divergieren. Es sind vielmehr numerische Artefakte. Da es sich hier um eine Hochtemperaturentwicklung handelt, ist es nicht verwunderlich, unsystematisches Verhalten

am Nullpunkt der Temperatur vorzufinden. Schätzt man grob ab, so gelangt man zu einer Übereinstimmung der Kettenbruchdarstellungen bis hinunter zu einer Temperatur von $T/J \approx 0.4$. Dies wird in Abschnitt 5.3 im Vergleich mit exakten Resultaten aus dem Bethe-Ansatz bestätigt.
In Abbildung 5.2 sind verschiedene Kettenbruchdarstellungen für die Suzeptibilität χ der unfrustrierten Kette des Polynoms in der 16.Ordnung dargestellt. Hier unterscheiden sich die höchsten Ordnungen der Kettenbruchdarstellungen unwesentlich. In der Ausschnittsvergrößerung ist die $\chi[16]$-Darstellung weggelassen, da sie sich nur unwesentlich von der $\chi[17]$-Darstellung unterscheidet. In diesem Fall kann man den Ergebnissen bis hinunter zu einer Temperatur von $T/J \approx 0.4$ Glauben schenken. Bis $T/J \approx 0.4$ stimmen die $\chi[16]$- und $\chi[17]$-Darstellung sicher überein und die $\chi[14]$-Kettenbruchdarstellung knickt an dieser Stelle ab. Diese stimmt auch mit den bisherigen Feststellungen aus Abbildung 5.1 überein. Diese Knickstelle kann als Anhaltspunkt gewählt werden, um Aussagen über die Glaubwürdigkeit der Ergebnisse zu machen. In den Vergleichen mit schon vorhandenen Lösungen wird dies nochmals explizit erwähnt werden (Abschnitt 5.3 und 5.4).
Der Anhaltspunkt der Knickstelle kann in Abbildung 5.3 nicht verwendet werden.

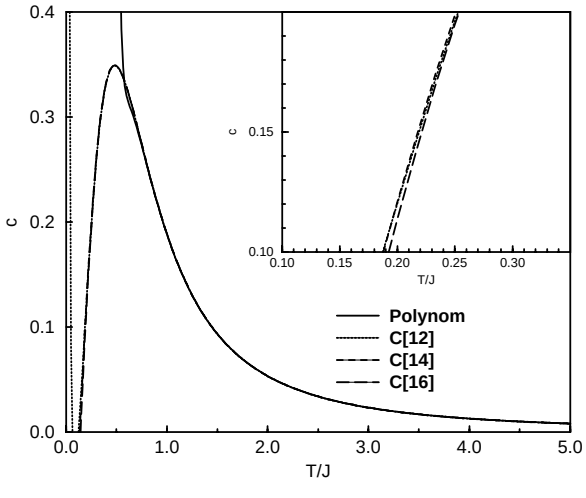


Abbildung 5.3: Verschiedene Kettenbruchdarstellungen der spezifischen Wärme $c(T)$ in der 16. Ordnung

Hier sieht man verschiedene Kettenbruchdarstellungen und das Polynom der spezifischen Wärme $c(T)$. Auch hier prägt sich erst durch die Kettenbruchdarstellungen die Struktur eines Maximums aus. Im Vergleich zu den Kettenbruchdarstellungen der Suszeptibilität unterscheiden sich die Kettenbruchdarstellungen kaum oder gar nicht voneinander, so daß man hier auf den ersten Blick vermuten könnte, glaubhafte Ergebnisse bis hinunter zu $T/J \approx 0.2$ erzielt zu haben. Hier

fächern die verschiedenen Darstellungen auf (siehe Ausschnittsvergrößerung).
Bei der Berechnung der spezifischen Wärme (Gleichung 4.1) verliert man durch das Ableiten eine Information, so daß insgesamt 16 Informationen zur Verfügung stehen. Im Vergleich zur Suszeptibilität ist das eine Information weniger. Man kann davon ausgehen, daß der glaubhafte Bereich ähnlich wie bei der Suszeptibilität bei $T/J \geq 0.4$ liegt. Im Tieftemperaturbereich stimmen die Darstellungen nicht mit dem exakten Ergebnis $c(0) = 0$ überein. In Abschnitt 5.2 werden diese Informationen miteingebunden und mit exakten Resultaten aus dem Bethe-Ansatz verglichen. Es wird sich herausstellen, daß man dann mit der Kettenbruchdarstellung sogar zu noch tieferen Temperaturen hin sehr gute Resultate erzielt.
Für die Entropie gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten der Approximation. Zum einen kann man wie bisher das Polynom als Kettenbruch darstellen, und zum anderen kann man in Gleichung 4.2 schon mit der Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme arbeiten, wodurch die berechnete Entropie direkt in einer verbesserten Darstellung vorliegt. Dies hat natürlich seine Grenzen, da man allgemein nicht beliebig große Ordnungen einer Kettenbruchdarstellung analytisch integrieren kann. Dies ist wohl numerisch möglich. In der vorliegenden Arbeit wurde versucht, in niedrigen Ordnungen die spezifische Wärme in der Kettenbruchdarstellung analytisch zu integrieren im Vergleich zu hohen Ordnungen der Kettenbruchdarstellungen des Polynoms der Entropie. Durch die Integration der spezifischen Wärme (Gleichung 4.2) mit 16 Informationen gewinnt man wieder eine Information, so daß für die Darstellung der Entropie 17 Informationen zur Verfügung stehen.
In Abbildung 5.4 sind beide Möglichkeiten dargestellt. Dabei ist hier eine Ket-

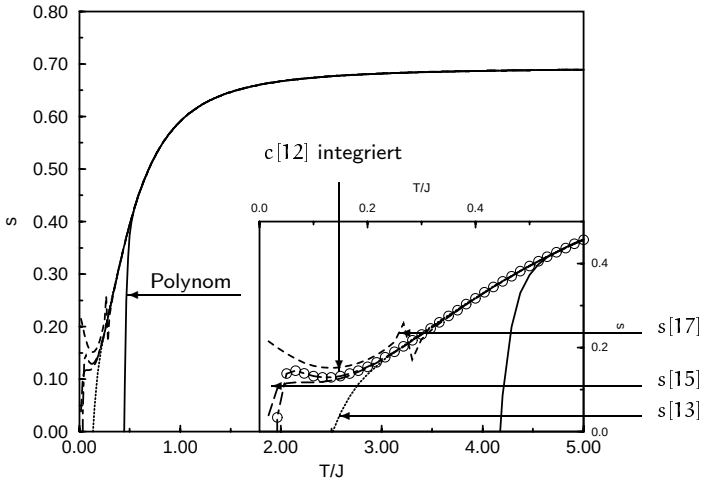
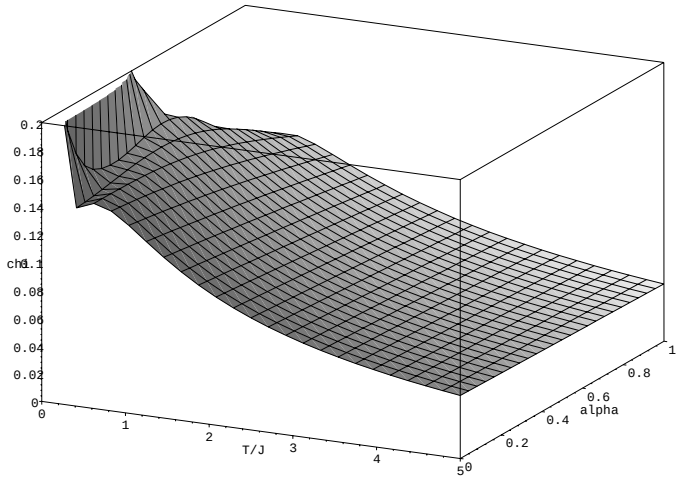


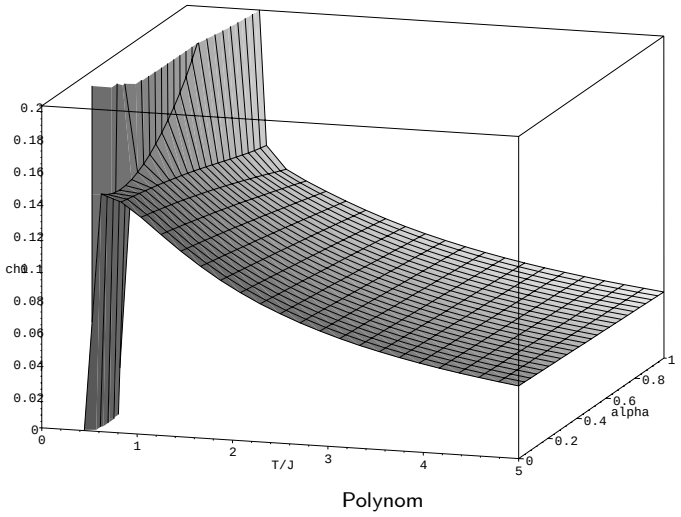
Abbildung 5.4: Verschiedene Kettenbruchdarstellungen der Entropie $s(T)$ in der 16. Ordnung

tenbruchdarstellung der spezifischen Wärme in einer niedrigen Ordnung verwendet worden (in der Ausschnittsvergrößerung durch Kreise hervorgehoben). Schon mit dieser niedrigen Ordnung werden sehr gute Resultate erzielt, wie der Vergleich mit den Kettenbruchdarstellungen des Polynoms der Entropie zeigt. Auch hier stimmen die $s[13]$- und $s[15]$-Darstellungen bis hinunter zu $T/J \approx 0.2$ sehr gut überein. Erst durch die Hinzunahme der $s[17]$-Darstellung kann man den glaubhaften Bereich auf $T/J \geq 0.3$ festlegen. Hier handelt es nicht um eine Knickstelle, sondern um eine schwache Singuarität, die durch die Kettenbruchdarstellung erzeugt wird. Sie hat keine physikalische Bedeutung. Diese schwache Singularität deutet an, daß eine Kettenbruchdarstellung des Polynoms der Entropie nicht sinnvoll ist. Für $T \to 0$ kann die Kettenbruchdarstellung den analytischen Wert von $s(0) = 0$ nicht reproduzieren. In Abschnitt 5.2 wird dies noch verbessert werden.

Die thermodynamischen Größen der frustrierten Kette sind sehr auf die Darstellung über Kettenbrüche angewiesen. Hier liegen Ergebnisse im Vergleich zu den Ergebnissen der unfrustrierten Kette nur bis zur 10. Ordnung in β vor, da bei den computergestützten Rechnungen größere Systeme als bei der unfrustrierten Kette betrachtet werden müssen. Dadurch gelangt man schneller an die Speichergrenze der zur Verfügung stehenden Computer. Es ist nun besonders wichtig, bis zu welcher Temperatur man den Ergebnissen Glauben schenken darf. In der ersten Betrachtung der Polynome der Suszeptibilität erkennt man nur den $\propto 1/T$ Anteil des Hochtemperaturbereiches. Erst durch die Kettenbruchdarstellung prägt sich für tiefere Temperaturen $T/J < 1$ eine Schulter aus, die man auch für die frustrierte Kette erwartet. Diese Information erhält man aus dem berechneten Verhalten für großes T und dem Verhalten der Suszeptibilität für $T = 0$, bei der diese verschwindet oder einen konstanten Wert größer Null annimmt. Dies hängt vom Frustrationsparameter α ab (siehe Abschnitt 5.2).



Kettenbruchdarstellung



Polynom

Abbildung 5.5: Darstellung der Suszeptibilität der frustrierten Kette in Abhängigkeit des Frustrationsparameters α und T/J als Polynom χ in 10. Ordnung (unten) und als entsprechende Kettenbruchdarstellung $\chi[11]$ (oben)

Die in Abbildung 5.5 dargestellte Suszeptibilität in Abhängigkeit von α und T/J zeigt in der Polynom-Darstellung noch keine zuverlässige Struktur für $T/J < 1$. Abhängig vom Vorzeichen des Koeffizienten der höchsten Ordnung in β divergiert das Polynom nach $+\infty$ oder $-\infty$. Bei der Kettenbruchdarstellung hingegen prägt sich die Struktur einer Schulter aus.
In den weiteren Darstellungen der Ergebnisse für die frustrierte Kette wird mit einem festen Frustrationsparameter von $\alpha = 0.35$ gearbeitet. Dieser Wert wird in Zusammenhang mit $CuGeO_3$ [16, 17] viel verwendet.

In den Abbildungen 5.6, 5.7 und 5.8 sind für $\alpha = 0.35$ die Suszeptibilität, die spezifische Wärme und die Entropie dargestellt.

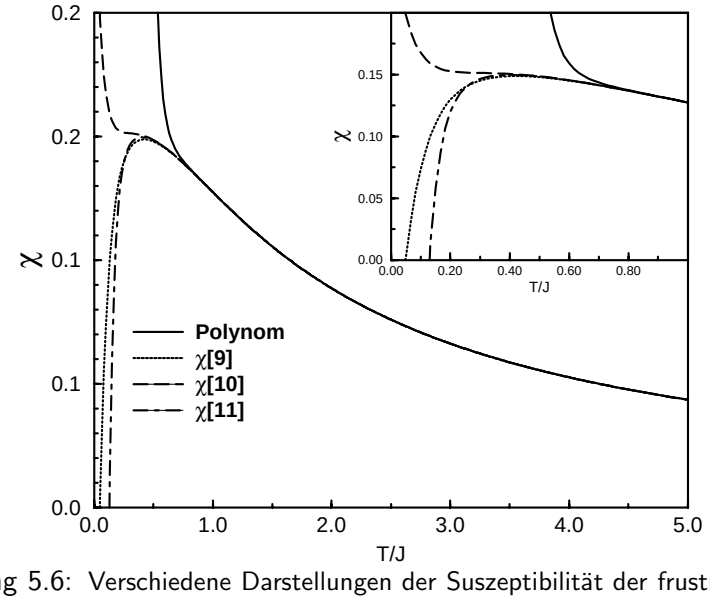


Abbildung 5.6: Verschiedene Darstellungen der Suszeptibilität der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$

Die Suszeptibilität kann hier bis zu $T/J \approx 0.4$ gut beschrieben werden. Für die spezifische Wärme kann ebenfalls die Knickstelle der c[9]-Darstellung als Anhaltspunkt gewählt werden. Der zuverlässige Bereich liegt bei $T/J \geq 0.5$. Diese Ordnungen in den Approximationen sind noch zulässig für die vorliegende Ordnung des Polynoms. Die Entropie in Abbildung 5.8 zeigt bis hinunter zu $T/J \approx 0.25$ eine gute Übereinstimmung aller Kettenbruchdarstellungen. Auch hier ist eine Darstellung der Entropie, bei der man die Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme integriert, eine vergleichsweise sehr gute Darstellung, wie dies auch bei der Bestimmung der Entropie der unfrustrierten Kette der Fall war.

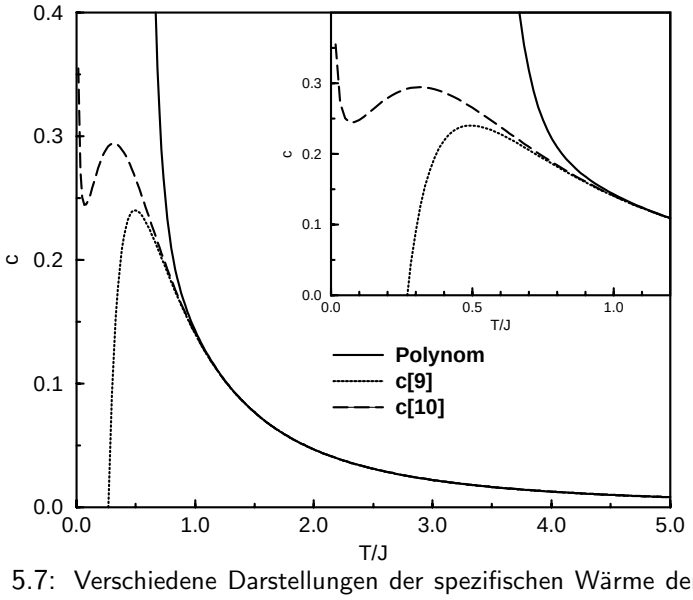


Abbildung 5.7: Verschiedene Darstellungen der spezifischen Wärme der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$

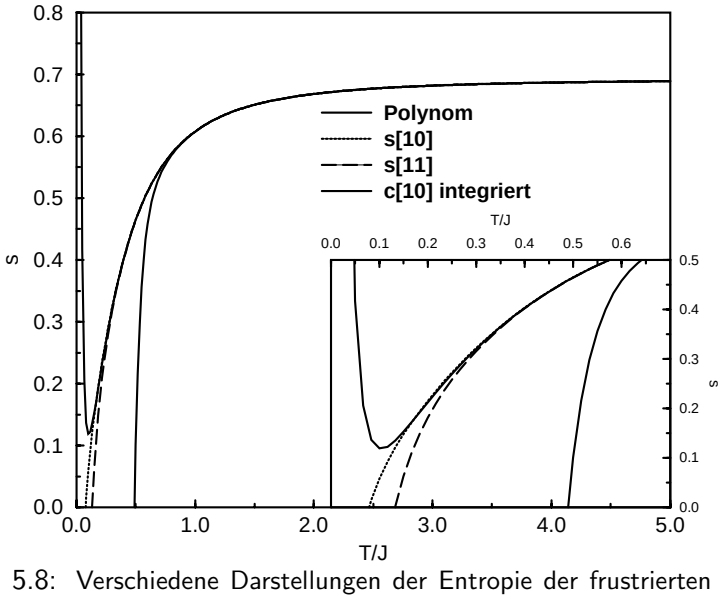


Abbildung 5.8: Verschiedene Darstellungen der Entropie der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$

5.2 Berücksichtigung des Tieftemperaturverhaltens

In diesem Abschnitt werden in die Kettenbruchdarstellungen der thermodynamischen Größen weitere Informationen eingebunden. Dabei handelt es sich um allgemeine Eigenschaften dieser Größen bei $T = 0$.
Um diese Informationen einzubinden, betrachtet man die Kettenbruchdarstellung $f[N]$ des Polynoms der jeweiligen Größe. Die Koeffizienten $c_0, \ldots, c_{N-1}$ des Kettenbruchs seien schon eindeutig bestimmt, siehe Abschnitt 5.1. Die Ordnung entspricht der maximal erlaubten Ordnung des Kettbruchs für die vorliegende Ordnung des Polynoms. Damit man k weitere Informationen miteinbeziehen kann, wird der Kettenbruch mit den Parametern $d_1, \ldots, d_k$ in seiner Ordnung erweitert

$$f^{erw}[N+k] = \cfrac{c_0}{x + c_1 + \cfrac{c_2}{x + c_3 + \cdots \cfrac{\ddots}{x + c_{N-1} + \cfrac{d_1}{x + d_2 + \cdots \cfrac{\ddots}{x + d_k}}}}} \quad . \tag{5.8}$$

Um die Parameter $d_1, \ldots, d_k$ zu bestimmen, muß ein Satz von k Gleichungen gelöst werden. Wird nur ein Parameter wie das Verhalten am Nullpunkt der Temperatur benötigt, muß man $f[N+1](0) = f_0$ lösen, um d_1 zu bestimmen. Der so gewonnene Ausdruck stellt gerade im Tieftemperaturbereich eine bessere Approximation dar.

Zur Bestimmung des Tieftemperaturverhaltens der thermodynamischen Größen geht man von einem linearen Verhalten der Dispersionsbeziehung aus $\omega(k) = v_S k$ mit der Spinwellengeschwindigkeit v_S. Mit dieser genäherten Dispersion werden die thermodynamischen Größen berechnet. Dieses Vorgehen stellt für $T = 0$ keine Einschränkung dar, da für die tiefliegenden Anregungen nur Energien in der Nähe der Fermikante relevant sind. Die Spinwellengeschwindigkeit v_S stellt somit die Energieskala für das Tieftemperaturverhalten dar.

Suszeptibilität

Aus einer Dimensionsbetrachtung mit $\beta\hat{H} \propto v_S/T$ mit obiger Dispersionsrelation folgt für die Suszeptibilität mit der allgemeinen Darstellung $\chi(T) = -\partial^2 F/\partial h^2$ mit $F = -1/\beta \ln Z$, daß $\chi(T \to 0) \propto 1/v_S$ ist. Bei der Bestimmung der Suszeptibilität für verschwindendes Magnetfeld bei $T = 0$ ergibt sich aus einer Bethe-Ansatz-Rechnung [7] für die unfrustrierte Kette

$$\chi(0) \quad = \quad \frac{1}{2\pi}\frac{1}{v_S} \text{ mit } v_S = \frac{\pi}{2} \tag{5.9}$$

nach [18]. In gleicher Weise wird das Tieftemperaturverhalten für die frustrierte Kette dargestellt mit einer nach [19] modifizierten Spinwellengeschwindigkeit

$$\begin{aligned} v_S &= \frac{\pi}{2}(1-1.12\alpha) \\ &\quad \text{für } \ 0 \leq \alpha < \alpha_c \ . \end{aligned} \tag{5.10}$$

Weiter gilt

$$\chi(0) = 0 \ \text{ für } \ \alpha \geq \alpha_c \ , \tag{5.11}$$

da hier der Grundzustand Singulettcharakter hat und die Dispersionsbeziehung für die tiefliegenden Anregungen eine Lücke aufweist.

Spezifische Wärme

Für das Verhalten der spezifischen Wärme in der Nähe des Nullpunkts der Temperatur können zwei Informationen eingebunden werden. Es gilt die Beziehung

$$c(T \approx 0) = \frac{\pi}{3}\frac{1}{v_S} \cdot T \tag{5.12}$$

mit v_S aus Gleichung 5.9 für die unfrustrierte Kette und der erweiterten Spinwellengeschwindigkeit nach Gleichung 5.10 für die frustrierte Kette. Auch hier kann die Proportionalität durch eine Dimensionsbetrachtung gewonnen werden. Mit der allgemeinem Darstellung der spezifischen Wärme $c(T) = -1/N\partial/\partial T(\partial \ln Z/\partial\beta)$ folgt $c(T \to 0) \propto T/v_S$. Exakte Rechnungen mit Hilfe des Bethe-Ansaztes [7] liefern die Proportionalitätskonstante.
Die zweite Information ergibt sich aus der Ableitung der Gleichung 5.12

$$\frac{d}{dT}c(T=0) = \frac{\pi}{3}\frac{1}{v_S} \ . \tag{5.13}$$

Somit stehen für die spezifische Wärme zwei Informationen zur Verfügung, um die Darstellung im Tieftemperaturbereich zu verbessern.

Entropie

Für die Entropie wird neben der schon eingebundenen Information für $T \to \infty$ die Information am Nullpunkt der Temperatur berücksichtigt mit

$$s(T=0) = 0 \tag{5.14}$$

nach dem 3. Hauptsatz der Thermodynamik, so daß

$$s(\infty) - s(0) = \ln 2 \tag{5.15}$$

gilt. Eine weitere Information ist nach Gleichung 4.2

$$\left.\frac{\partial s(T)}{\partial T}\right|_{T=0} = \left.\frac{c(T)}{T}\right|_{T=0} \ . \tag{5.16}$$

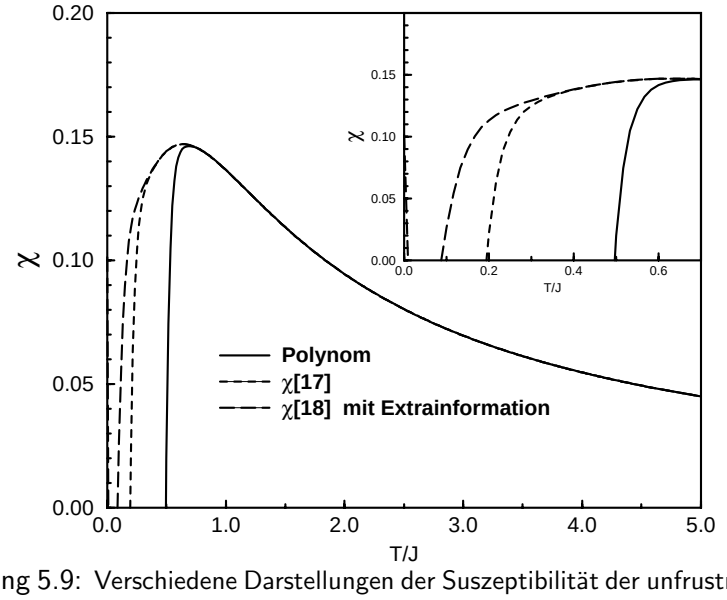


Abbildung 5.9: Verschiedene Darstellungen der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit eingebundener Extrainformation nach Gleichung 5.9

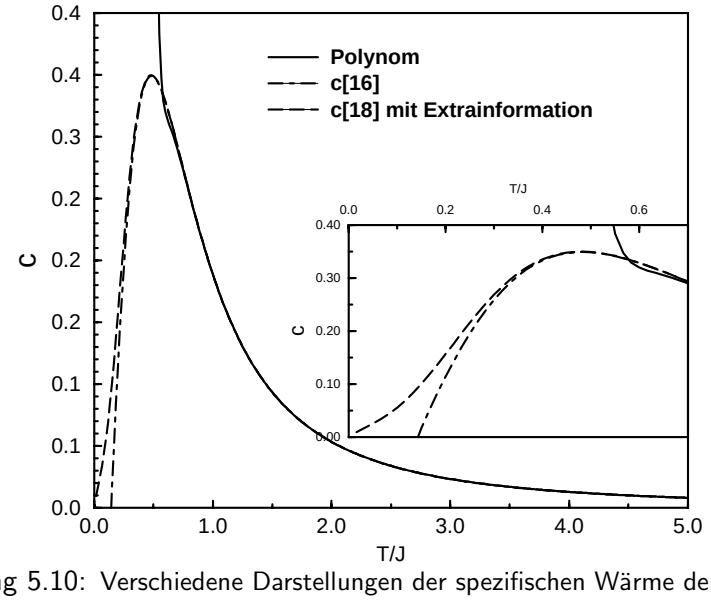


Abbildung 5.10: Verschiedene Darstellungen der spezifischen Wärme der unfrustrierten Kette mit eingebundenen Extrainformationen nach Gleichungen 5.12 und 5.13

Die Abbildungen 5.9, 5.10 und 5.11 zeigen den Effekt des Einbindens der Informationen über den Tieftemperaturbereich. In Abbildung 5.9 sieht man den Vergleich der $\chi[17]$-Darstellung der Suszeptibilität mit der $\chi[18]$-Darstellung, die die $T = 0$ Information nach Gleichung 5.9 enthält. Diese wurde in die $\chi[17]$-Darstellung eingebunden und wird hier als $\chi[18]$-Darstellung bezeichnet, da eine weitere Information enthalten ist. Das Einbinden der Information bewirkt für tiefe Temperaturen eine leichte Verschiebung der Suszeptibilität in Richtung $T = 0$. Für $T = 0$ erkennt man, daß χ den gewünschten Wert aus Gleichung 5.9 annimmt. Man kann davon ausgehen, daß durch die Extrainformation verläßliche Aussagen bis hinunter zu $T/J \approx 0.25$ möglich sind.
Bei der spezifischen Wärme in Abbildung 5.10 sollte der Effekt größer sein, da hier zwei weitere Informationen eingebunden wurden. Vom Informationsgehalt entspricht diese Darstellung der Darstellung der Suszeptibilität mit einer Extrainformation (Abbildung 5.9). Die Kettenbruchdarstellung mit den $c(0)$ und $c^{'}(0)$ Informationen zeigt das gewünschte Verhalten im Tieftemperaturbereich, wie es in den Gleichungen 5.12 und 5.13 beschrieben ist. Den Ergebnissen kann nun bis hinunter zu $T/J \approx 0.25$ vertraut werden. Noch tieferen Temperaturen sollte man keinen Glauben schenken, da dies außerhalb der Möglichkeiten dieser Methode liegt.

Für die Entropie sind verschiedene Möglichkeiten vorhanden, die Extrainformationen für $T = 0$ einzubinden. Zum einen kann man wie bisher vorgehen, und die

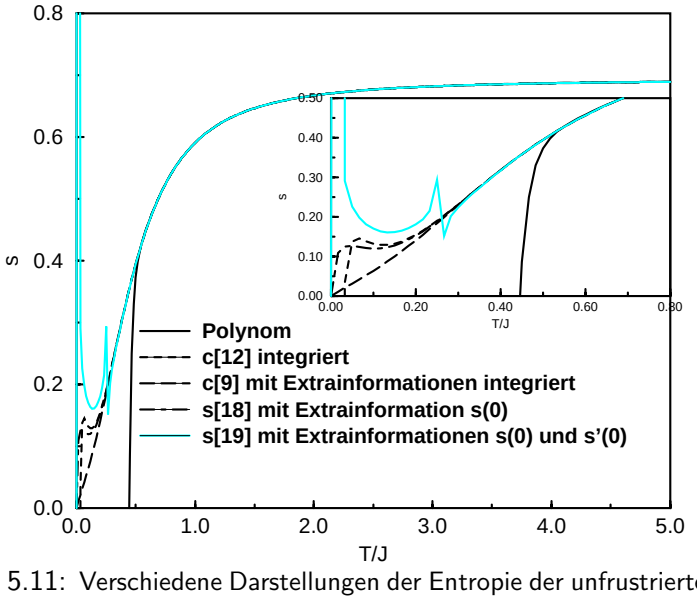


Abbildung 5.11: Verschiedene Darstellungen der Entropie der unfrustrierten Kette mit eingebundenen Extrainformationen nach Gleichungen 5.14 und 5.16

Entropie aus dem Polynom der spezifischen Wärme berechnen, und dann in der Kettenbruchdarstellung die weiteren Information einbeziehen ($s[18]$-Darstellung mit $s(0)$ Information und $s[19]$-Darstellung mit $s(0)$ und $s^{'}(0)$ Information in

Abbildung 5.11). Zum anderen kann man die Entropie mit der Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme mit deren Extrainformation berechnen, wobei noch ein weiterer Parameter offen ist, der dann über die $s(0)$-Eigenschaft bestimmt wird ($c[9]$-Darstellung mit Extrainformationen integriert).
Man stellt fest, daß schon für eine niedrige Ordnung der letztgenannten Möglichkeit sehr gute Resultate erzielt werden. Im Vergleich dazu liefert die erstgenannte Möglichkeit, bei der die $s(0)$-Information eingebunden ist, kaum verbesserte Resultate im Tieftemperaturbereich. Durch das zusätzliche Einbinden der $s^{'}(0)$-Information in der $s[19]$-Darstellung entsteht eine Singularität, die im Vergleich mit den anderen Darstellungen eine Verschlechterung bewirkt. Auch hier muß man feststellen, daß eine Kettenbruchdarstellung des Polynoms der Entropie nicht sinnvoll ist. Sinnvoll ist es, die Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme zu integrieren, da durch die Integration allgemein Funktionen geglättet werden und dies im vorliegenden Fall eventuell auftretende Singularitäten vermeidet.
Vernünftige Aussagen über die Entropie sind bis hinunter zu $T/J \approx 0.2$ möglich. Dies stellt auf den ersten Blick keine signifikante Verbesserung zu den bisherigen Ergebnissen ohne Extrainformation (Abbildung 5.4) dar. Die maximale Ordnung in der Kettenbruchdarstellung von c mit Extrainformationen sollte nach Integration und Einbinden der $s(0)$-Information schon sehr gute Resultate liefern.

Im weiteren werden die Ergebnisse für die frustrierte Kette vorgestellt. In Abbil-

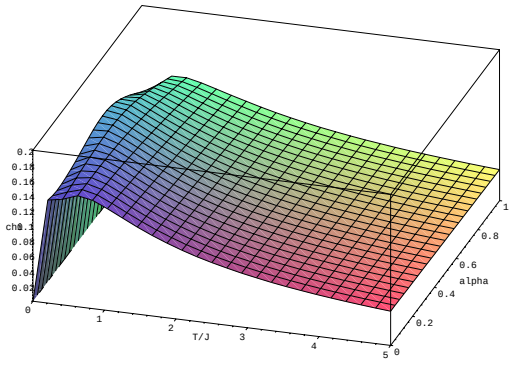


Abbildung 5.12: Darstellung der Suszeptibilität der frustrierten Kette in Abhängigkeit des Frustrationsparameters α und T/J als Kettenbruchdarstellung mit Berücksichtigung des Tieftemperaturverhaltens nach Gleichung 5.9

dung 5.12 ist die Suszeptibiltät in Abhängigkeit des Frustrationsparameters α und der Temperatur dargestellt. Im Vergleich zu Abbildung 5.5 ist hier deutlich mehr Struktur im Tieftemperaturbereich festzustellen. Man erkennt deutlich ein Maximum. Das Einbinden der Extrainformation läßt es auch hier zu, vernünftige Aussagen zu tieferen Temperaturen zu machen. In den folgenden Abbildungen sollen diese für den Wert $\alpha = 0.35$ explizit aufgezeigt werden.

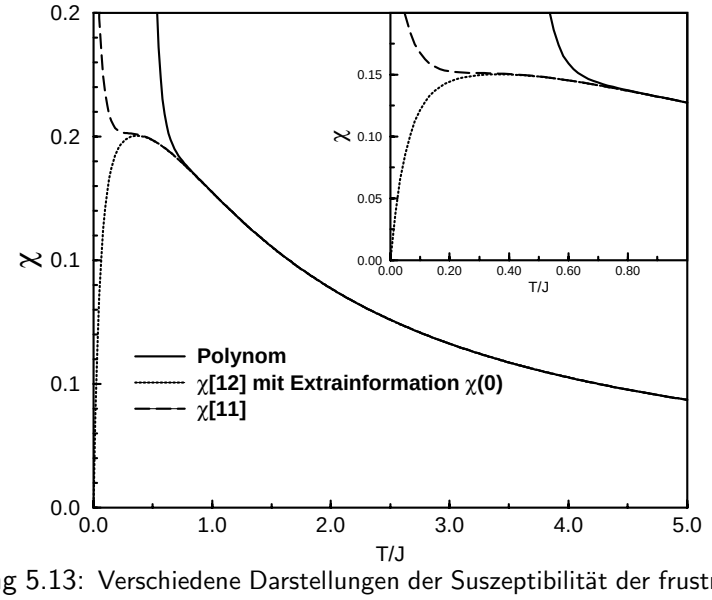


Abbildung 5.13: Verschiedene Darstellungen der Suszeptibilität der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$ und eingebundener Extrainformation

Abbildung 5.13 zeigt die frustrierte Suszeptibiliät mit eingebundener Extrainformation für $T = 0$ ($\chi[12]$-Darstellung mit Extrainformation $\chi(0)$ nach Gleichung 5.11). Dieser ist die $\chi[11]$-Darstellung gegenübergestellt. Dabei ist $\chi[11]$ die höchste zulässige Ordnung der Kettenbruchdarstellung für das vorliegende Polynom. Bisher konnte die Suszeptibilität bis $T/J \approx 0.4$ gut beschrieben werden (Abbildung 5.6). Die neue Darstellung mit der $\chi(0)$-Extrainformation läßt sicherlich vernünftige Aussagen für tiefere Temperaturen zu, so daß man eine verläßliche Darstellung bis zu $T/J \approx 0.3$ hat.

Abbildung 5.14 zeigt die spezifische Wärme mit eingebundenen Extrainformationen ($c[12]$-Darstellung mit Extrainformationen $c(0)$ und $c^{'}(0)$). Vergleicht man diese mit der $c[10]$-Darstellung, so lassen sich hier verläßliche Aussagen bis zu $T/J \approx 0.3$ machen im Vergleich zu $T/J \approx 0.5$ ohne Extrainformationen (siehe Abbildung 5.7). Diese sehr gute Verbesserung ist darauf zurückzuführen, daß man zwei weitere Informationen miteinbindet im Vergleich zu nur einer Information bei der Suszeptibilität.

Zur Darstellung der Entropie in Abbildung 5.15 wurden wieder zwei verschiedene Möglichkeiten genutzt, nämlich zum einen über die Integration der Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme ($c[9]$-Darstellung mit Extrainformationen $c(0)$ und $c^{'}(0)$ integriert nach Gleichungen 5.12 und 5.13) und zum anderen die Integration des Polynoms der spezifischen Wärme mit anschließender Kettenbruchdarstellung ($s[12]$-Darstellung mit Extrainformation $s(0)$ nach Gleichung 5.14). In Abbildung 5.15 sieht man deutlich den Unterschied beider Möglichkeiten. Die erstgenannte Möglichkeit zeigt ein streng monotones Verhalten zum Nullpunkt der Temperatur hin, wohingegen die letztgenannte Möglichkeit im Bereich $T/J \approx 0.1$ noch ein Minimum annimmt (nicht sichtbar in der Abbil-

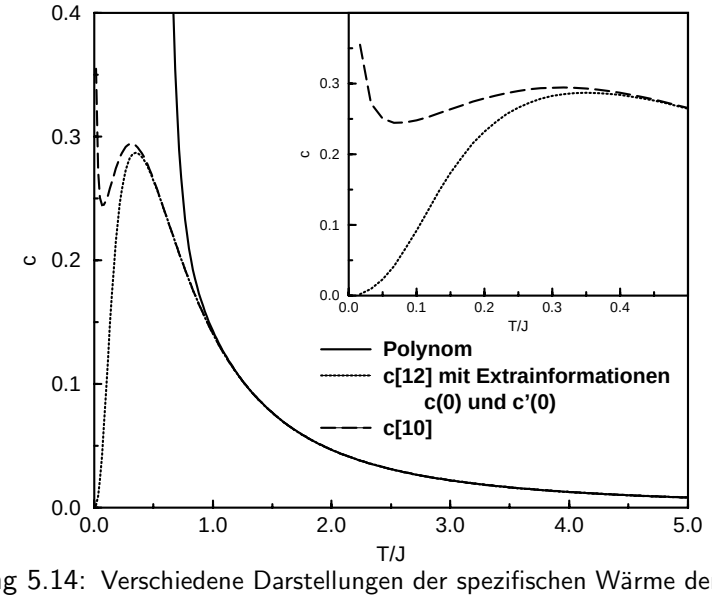


Abbildung 5.14: Verschiedene Darstellungen der spezifischen Wärme der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$ und eingebundenen Extrainformationen nach Gleichungen 5.12 und 5.13

dung). Trotzdem zeigt diese Darstellung das gewünschte Verhalten bei $T = 0$. Auch hier ist schon eine niedrige Ordnung der Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme ausreichend, um verläßliche Aussagen über die Entropie bis zu einer Temperatur von $T/J \approx 0.2$ machen zu können. Auf das Einbinden der $s'(0)$-Information wurde verzichtet, da auch hier wieder Singularitäten auftreten wie in Abbildung 5.4.

Allgemein kann man festhalten, daß die Kettenbruchdarstellungen alleine schon gute Resultate liefern. Durch das Einbinden der Extrainformationen werden die Darstellungen zu tiefen Temperaturen hin verläßlicher. Wie man bei der spezifischen Wärme sieht und allgemein erwartet, werden die Resultate desto besser, je mehr Informationen man einbezieht. Die Entropie läßt sich durch die Verwendung der Kettenbruchdarstellung der spezifischen Wärme schon in niedriger Ordnung sehr gut darstellen. Dies sind sehr gute Resultate, wenn man bedenkt, daß die Ergebnisse aus einer Hochtemperaturentwicklung stammen.
Die nächsten Abschnitte zeigen den Vergleich zum einen mit Lösungen aus dem Bethe-Ansatz für die unfrustrierte Kette und zum anderen mit Resultaten aus DMRG-Rechnungen für die frustrierte Kette.

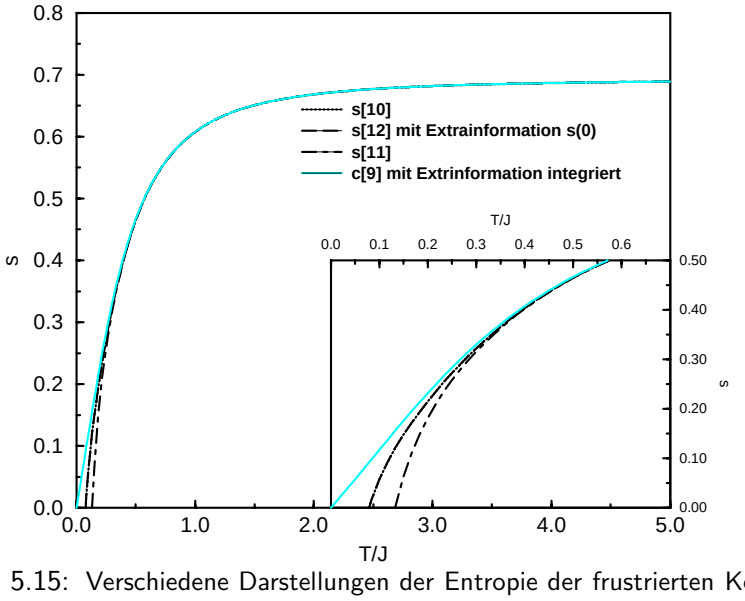


Abbildung 5.15: Verschiedene Darstellungen der Entropie der frustrierten Kette mit $\alpha = 0.35$ und eingebundener Extrainformation nach Gleichung 5.14

5.3 Vergleich mit Bethe-Ansatz

In diesem Abschnitt werden die Resultate aus den vorangegangenen Abschnitten mit Darstellungen der Suszeptibilität und der spezifischen Wärme aus exakten Rechnungen mit Hilfe des Bethe-Ansatzes verglichen. Da eine Bethe-Ansatz-Lösung nur für die unfrustrierte Kette möglich ist, wird in diesem Abschnitt nur der Fall $\alpha = 0$ untersucht.
Der Bethe-Ansatz ist eine exakte Methode, um die Eigenwerte und Eigenvektoren eines quantenmechanischen Systems zu bestimmen. Für das Heisenbergmodell mit Nächstnachbar-Wechselwirkung

$$\mathbf{H} = J \sum_{n=1}^{N} \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n+1} = J \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+ \right) + \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z \right) \tag{5.17}$$

sind zwei Symmetrien für die Anwendung des Bethe-Ansatzes von entscheidender Bedeutung, zum einen die Rotationssymmetrie um die z-Achse (Quantisierungsachse) und zum anderen die Translationssymmetrie bezüglich des diskreten Gitterabstandes. Die z-Komponente des Gesamtspins $\hat{S}_T^z = \sum_{n=1}^{N} \hat{S}_n^z$ wird genutzt, um Eigenzustände von $\mathbf{H}$ zu klassifizieren. $\hat{S}_T^z$ ist eine Erhaltungsgröße, da $[\mathbf{H}, \hat{S}_T^z]$ gilt. Man startet beispielsweise mit einem vollpolarisierten Startzustand mit $S_T^z = N/2$, d.h. für alle Kettenplätze gilt $S^z = 1/2$. Sukzessiv konstruiert man Eigenzustände zu $S_T^z = N/2 - r$ mit $r = 0, \ldots, N$, deren direkte Summe den Hilbertraum von $\mathbf{H}$ aufspannt. Dies entspricht einer Blockdiagonalisierung von $\mathbf{H}$.
Für den Unterraum mit $S_T^z = N/2 - 2$ ist der Eigenzustand durch

$$|\Psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < n_2 \leq N} a\,(n_1, n_2)\,|n_1, n_2\rangle \tag{5.18}$$

gegeben mit $S_{n_1}^z = S_{n_2}^z = -1/2$ als Superposition aller möglichen Basiszustände. Bethes erster Ansatz für die Koeffizienten $a\,(n_1, n_2)$ ist

$$a\,(n_1, n_2) = A e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + A' e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} \tag{5.19}$$

mit Wellenzahlen $k_i = 2\pi m/N$ und $m = 0, \ldots, N-1$. Unter Ausnutzung der Translationssymmetrie und durch Lösen der Eigenwertgleichung $\mathbf{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ erhält man die Bestimmungsgleichung für die Koeffizienten, die die Streuung zweier ebener Wellen (Spinwellen) darstellen. Dabei werden Bethe-Quantenzahlen eingeführt, deren Bestimmung alle Eigenzustände für den $r = 2$ Unterraum liefern. Allgemein werden durch den Bethe-Ansatz N-Teilchen Streuprozesse in effektive 2-Teilchen Streuprozesse faktorisiert. Im Heisenbergmodell mit Übernächstnachbar-Wechselwirkung ist dies nicht mehr exakt durchführbar, so daß keine Lösung über den Bethe-Ansatz möglich ist.
Die Konstruktion aller weiteren Unterräume mit $r > 2$ läßt sich somit auf die Bestimmungsgleichung der Koeffizienten für $r = 2$ zurückführen, siehe z.B. [20].

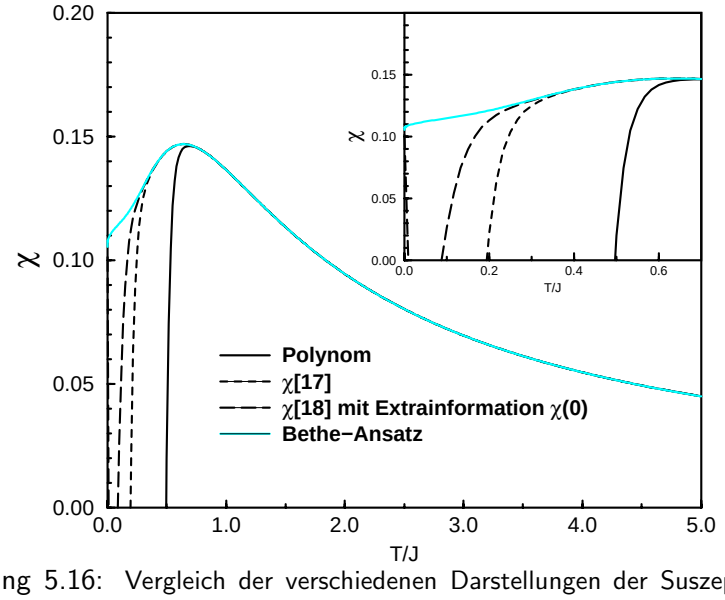


Abbildung 5.16: Vergleich der verschiedenen Darstellungen der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit Resultat aus dem Bethe-Ansatz

Zur Berechnung von physikalischen Größen bei endlichen Temperaturen wird der oben geschilderte Bethe-Ansatz mit der Methode der Transfermatrizen kombiniert [21].

Die folgenden Abbildungen zeigen die bisherigen Darstellungen der Suszeptibilität und der spezifischen Wärme der unfrustrierten Kette im Vergleich zu den Resultaten aus den Bethe-Ansatz-Rechnungen [7].
Abbildung 5.16 zeigt den Vergleich der verschiedenen Darstellungen der Suszeptibilität. Die bisherigen Darstellung ließen vernünftige Aussagen bis $T/J \approx 0.4$ für die Kettenbruchdarstellung und bis $T/J \approx 0.25$ für die Kettenbruchdarstellung mit $T = 0$ Information zu. Diese Abschätzung wird durch den Vergleich mit dem Resultat aus dem Bethe-Ansatz bestätigt. Man kann für die Kettenbruchdarstellung mit $T = 0$ Information vernünftige Aussagen sogar bis $T/J \approx 0.2$ zulassen. Die logarithmische Singularität bei $T = 0$, die durch die Rechnungen über den Bethe-Ansatz bestimmt wurde, läßt sich mit der Methode der Hochtemperaturentwicklung nicht beschreiben und das Ausreißen der Darstellung für kleine T/J ins Negative ist noch unbefriedigend. Im Hochtemperaturbereich stimmen alle Darstellungen überein.
Die spezifische Wärme sollte durch das Einbinden von zwei weiteren Informationen zu tieferen Temperaturen hin verläßlich sein. In Abbildung 5.17 wird dies deutlich bestätigt. Die Kettenbruchdarstellung mit den $T = 0$ Informationen stimmt fast mit dem Resultat aus dem Bethe-Ansatz überein. Für $T/J \approx 0.1$ beträgt die relative Abweichung ungefähr 20%. Auch hier stimmen die bisherigen Abschätzungen über die Glaubwürdigkeit der Darstellungen mit den wirklichen Ergebnissen überein, d.h. für die Kettenbruchdarstellung bis zu $T/J \approx 0.3$ und

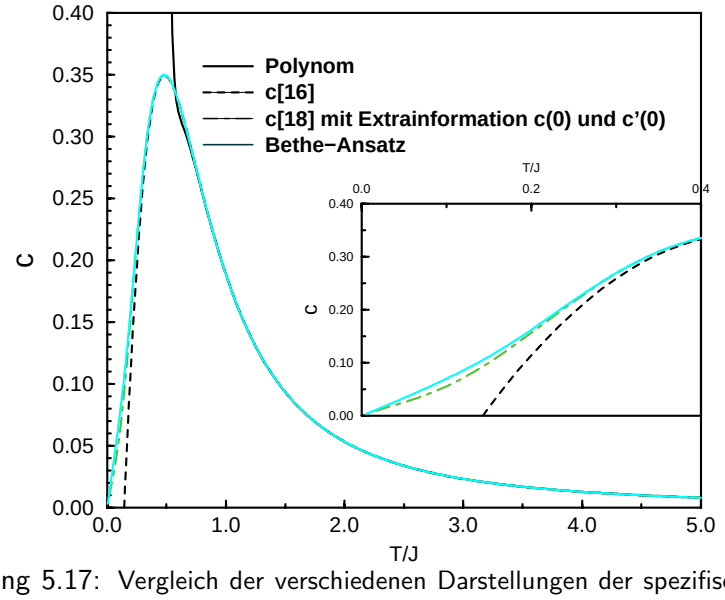


Abbildung 5.17: Vergleich der verschiedenen Darstellungen der spezifischen Wärme der unfrustrierten Kette mit Resultat aus dem Bethe-Ansatz

für die Kettenbruchdarstellung mit den $T = 0$ Informationen bis zu $T/J \approx 0.2$. Der Vergleich mit dem exakten Ergebnis zeigt auch hier, daß man für die Kettenbruchdarstellung mit Extrainformationen vernünftige Aussagen sogar bis zu $T/J \approx 0.15$ machen kann. Im Hochtemperaturbereich stimmen alle Darstellungen überein.

Der Vergleich mit den exakten Ergebnissen zeigt, daß die bisherigen Abschätzungen über die Glaubwürdigkeit der Darstellungen richtig waren und teilweise sogar vorsichtig verbessert werden können. Allgemein kann man festhalten, daß mit der Methode der Hochtemperaturentwicklung und durch das Einbinden von Extrainformationen über den Tieftemperaturbereich sehr gute Resultate erzielt werden können.

5.4 Vergleich mit DMRG

Dieser Abschnitt zeigt den Vergleich der Ergebnisse für die frustrierte Kette mit Ergebnissen aus DMRG-Rechnungen. Dabei können hier die Suszeptibilität, die spezifische Wärme und die Entropie verglichen werden. Der Vergleich beschränkt sich auf $\alpha = 0.35$.
Die ursprüngliche DMRG-Methode ist ein numerischer Zugang zur Bestimmung von physikalischen Größen bei $T = 0$ [22, 23]. Am Beispiel einer $S = 1/2$-Kette soll die gundlegende Funktionsweise dieser Methode erläutert werden.

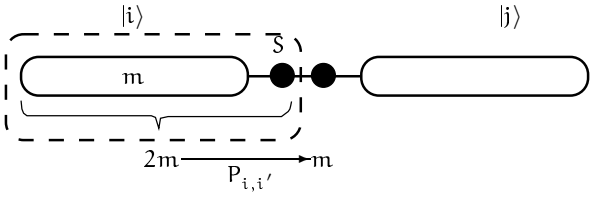


Abbildung 5.18: Schematische Darstellung der Funktionsweise des DMRG-Algorithmus für ein $S = 1/2$-System

Ausgehend von einem eindimensionalen System der Länge N, dessen Grundzustand durch exakte Diagonalisierung bekannt ist und einen Hilbertraum der Dimension $m = 2^N$ aufspannt, werden sukzessiv weitere Plätze an dieses System angehängt. Da die Grenze der exakten Diagonalisierung schon für kleine Systemgrößen schnell erreicht ist ($N \approx 30$), wird durch die DMRG-Methode versucht, die m relevantesten Zustände auszuwählen, mit denen man das größer werdenden System approximativ beschreibt.
Seien, wie in Abbildung 5.18 veranschaulicht, die m Zustände des Ausgangssystem bekannt. Durch die Erweiterung um einen Platz vergrößert sich die Dimension des Hilbertraums des neuen Systems auf $2m$. Um die m wichtigsten Zustände für ein Subsystem auszuwählen, betrachtet man zur Simulation eines unendlich großen Systems ein doppelt so großes System. Der Grundzustand $|\Psi\rangle$ dieses Systems kann mittels des direkten Produkts der Basiszustände der erweiterten Subsysteme $|i\rangle$, $|j\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \tag{5.20}$$

mit Koeffizienten Ψ_{ij} ausgedrückt werden. Um die m Zustände mit größter Wahrscheinlichkeit auszuwählen, betrachtet man die Dichtematrix

$$P_{i,i'} = \sum_{j} \Psi_{i\ j} \Psi^*_{i'j} \tag{5.21}$$

und bestimmt die m größten Eigenwerte und deren zugehörige Eigenvektoren. Die so bestimmten m Eigenvektoren dienen als Basis des neuen Systems. Diese Basistransformation wird nach jeder Erweiterung des Systems durchgeführt.

Zur Berechnung von physikalischen Größen bei endlichen Temperaturen wird der oben geschilderte DMRG-Zugang mit der Methode der Transfermatrizen kombiniert [24–26].

In den Abbildungen 5.19, 5.20 und 5.21 sind die bisherigen Darstellungen den Ergebnissen aus DMRG-Rechnungen [27] gegenübergestellt.

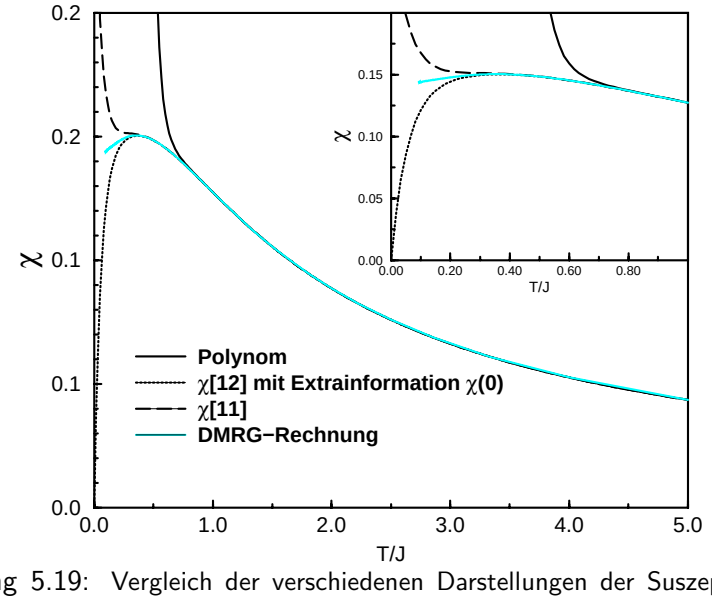


Abbildung 5.19: Vergleich der verschiedenen Darstellungen der Suszeptibilität der frustrierten Kette mit DMRG-Rechnung bei $\alpha = 0.35$.

Abbildung 5.19 zeigt die verschiedenen Darstellungen der Suszeptibilität. Der Vergleich mit dem Resultat aus der DMRG-Rechnung zeigt eine Übereinstimmung für die Kettenbruchdarstellung bis $T/J \approx 0.4$ und für die Kettenbruchdarstellung mit $T = 0$ Information bis $T/J \approx 0.25$. Die Abschätzungen aus den vorangegangenen Abschnitten ergaben etwas höhere Werte. Dies ist ein sehr gutes Ergebnis, wenn man bedenkt, daß für die frustrierte Kette die Ergebnisse nur bis zur 10. Ordnung vorliegen.
Für die spezifische Wärme in Abbildung 5.20 erwartet man ein besseres Ergebnis, da zwei weitere Informationen über das Tieftemperaturverhalten eingebunden sind. Dabei muß natürlich beachtet werden, daß der Informationsgehalt der Darstellung der spezifischen Wärme mit zwei Extrainformationen dem Informationsgehalt der Suszeptibilität mit einer Extrainformation entspricht. Dies liegt daran, daß man durch die Ableitung in Gleichung 4.1 eine Information gegenüber der Suszeptibilität verliert. Man muß für die Darstellung mit eingebundenen $T = 0$ Informationen im Bereich $T/J \approx 0.25$ eine Abweichung von ungefähr 2% feststellen. Diese Abweichung ist sehr klein, so daß die Abschätzungen aus den vorherigen Abschnitten im Vergleich mit dem Resultat aus der DMRG-Rechnung richtig waren und sogar noch verbessert werden können. Insgesamt kann man festhalten, daß für die Kettenbruchdarstellung vernünftige Aussagen

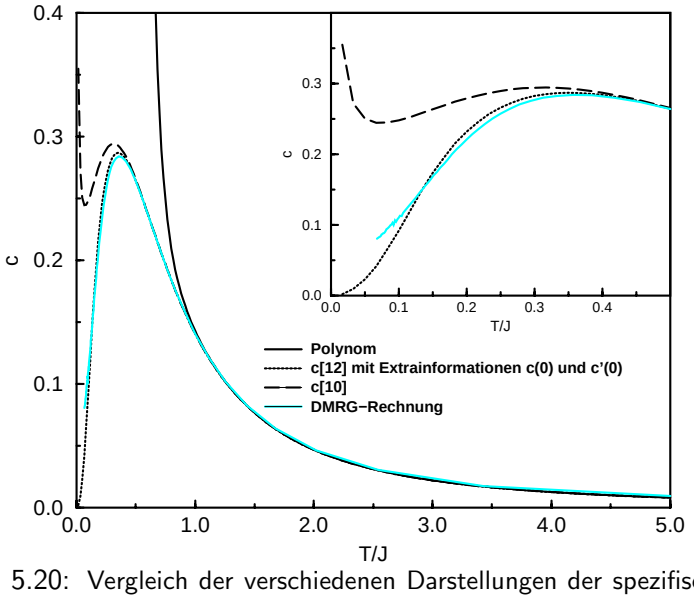


Abbildung 5.20: Vergleich der verschiedenen Darstellungen der spezifischen Wärme der frustrierten Kette mit DMRG-Rechnung bei $\alpha = 0.35$.

bis $T/J \approx 0.4$ und für die Kettenbruchdarstellung mit $T = 0$ Informationen bis $T/J \approx 0.25$ möglich sind. Im Hochtemperaturbereich stimmen alle Darstellungen überein.

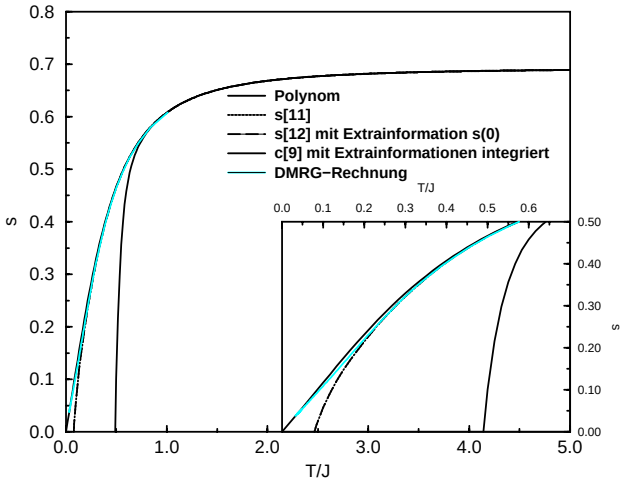


Abbildung 5.21: Vergleich der verschiedenen Darstellungen der Entropie der frustrierten Kette mit DMRG-Rechnung bei $\alpha = 0.35$.

Der Vergleich der verschiedenen Darstellungen der Entropie mit dem Resultat aus der DMRG-Rechnung ist in Abbildung 5.21 zu sehen. Auch hier ist die Kettenbruchdarstellung mit Extrainformation die beste Darstellung. Im Vergleich

dazu ist die Kettenbruchdarstellung in niedriger Ordnung, bei der die Kettenbruchdarstellung mit den $T = 0$ Informationen der spezifischen Wärme integriert wurde, ebenfalls eine sehr gute Näherung. Die relative Abweichung beträgt etwa 5% bei $T/J \approx 0.2$. Eine exakte Übereinstimmung dieser Darstellung wird bis ungefähr $T/J \approx 0.4$ erreicht. Die bisherigen Abschätzungen werden durch den Vergleich bestätigt, d.h bis $T/J \approx 0.25$ für die Kettenbruchdarstellung und bis $T/J \approx 0.2$ für die Kettenbruchdarstellung mit Extrainformation. Im Hochtemperaturbereich stimmen alle Darstellungen überein.

Auch hier sind die Ergebnisse aus der Hochtemperaturentwicklung sehr gut, obwohl im Vergleich zur unfrustrierten Kette nur die 10. Ordnung der Entwicklung vorliegt.

6 Darstellungen mit Hilfe der Dispersion

Bisher wurde die Suszeptibilität $\chi(T)$ über einen Kettenbruch dargestellt, dessen Koeffizienten c_i über eine Hochtemperaturentwicklung bestimmt wurden. Hier wird ein alternativer Zugang gewählt, bei dem eine Näherung $\chi_0(T)$ der Suszeptibilität über Dispersionsdaten bestimmt wird, die im Limes $T \to 0$ für lückenbehaftete Systeme exakt wird [28] und den Limes $T \to \infty$ richtig darstellt. Man hat einen Ausdruck zur Verfügung, der beide Grenzwerte beinhaltet. Mit diesem Ausdruck und der Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität aus den vorangegangenen Abschnitten ist es möglich, eine neue Kettenbruchdarstellung in der neuen „Variablen" $\chi_0(T)$ zu gewinnen. Dabei werden die hier zu bestimmenden Koeffizienten über die Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität bestimmmt, so daß die Taylorentwicklung des neuen Kettenbruchs bis zu der entsprechenden Ordnung mit dem Polynom aus der Hochtemperaturentwicklung exakt übereinstimmt.
Mit dieser Darstellung soll für die unfrustrierte Kette der Vergleich mit den bisherigen Darstellungen und den exakten Resultaten über den Bethe-Ansatz gezeigt werden.

Zur Bestimmung von $\chi_0(T)$ wird von einer dimerisierten, frustrierten $S=1/2$-Kette ausgegangen. Dabei tritt in realen Systemen die Dimerisierung entweder aufgrund der Spin-Phonon-Kopplung auf und ist temperaturabhängig ($CuGeO_3$ [1], $\alpha' - NaV_2O_5$ [2] $\to$ Spin-Peierls-Substanzen), oder sie ist durch die chemische Struktur der Kopplungen vorgegeben ($(VO)_2P_2O_7$ [5]).
Der Hamiltonoperator einer dimerisierten frustrierten $S=1/2$-Kette ist durch

$$\mathbf{H} = J \sum_{i=1}^{N} \left(\left(1 + (-1)^i \delta \right) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_{i-1} \mathbf{S}_{i+1} \right) \tag{6.1}$$

gegeben. Dabei ist δ aus dem Intervall $[0, 1]$ und α der Frustrationsparameter. Im Grundzustand hat das System mit $J > 0$ einen starken lokalen Singulettcharakter mit langreichweitigen antiferromagnetischen Korrelationen. Dabei bilden sich die Dimere, die einen erhöhten Singulettcharakter aufweisen, zwischen Plätzen, die durch $J(1+\delta)$ gekoppelt sind.
Wie sehen in diesem System die elementaren Anregungen aus? Im System der nicht dimerisierten Kette sind die elementaren Anregungen aus dem $S = 0$ Grundzustand heraus Paare von Spinonen, die jeweils $S = 1/2$ Charakter haben. Für die Kette sind dies asymptotisch freie Anregungen. Für $\alpha \geq \alpha_c$ sind diese Anregungen massiv, d.h. es öffnet sich eine Lücke in der Dispersionsbeziehung. Bei der dimerisierten Kette sind die elementaren Anregungen gebundene Spinonen-Paare mit $S = 1$. Man nennt diese Anregungen Magnonen. Zum Aufbrechen des lokalen Singulettcharakters ist immer eine Mindestenergie erforderlich, so daß die Dispersionsbeziehung eine Lücke aufweist mit $\omega(0) = \Delta \neq 0$.

Die $\Delta S = 1$ Ein-Magnon-Anregung manifestiert sich in der statischen Suszeptibilität bei Magnetfeld h. Die allgemeine Gleichung für die Suszeptibilität lautet

$$\chi(T) = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \ . \tag{6.2}$$

Dabei ist $F = -\beta^{-1} \ln Z$ die freie Energie. Im Fall der dimerisierten $S = 1/2$-Kette ist ein angeregtes Triplett (Magnon) ein hard-core Boson, da physikalisch nur ein Triplett pro Dimer möglich ist. Dadurch muß die Bose-Statistik bezüglich dieses Sachverhalts korrigiert werden. Die freie Energie pro Dimer ergibt sich für genügend kleine Temperaturen $T \ll \Delta$ nach [28] zu

$$f = -\beta^{-1} \ln \left(1 + [2\cosh(\beta h)]\, z(\beta)\right) \tag{6.3}$$

mit $h = g\mu_B H$ und der Zustandssumme für eine einzelne Anregung

$$z(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-\beta\,\omega(k)} \ . \tag{6.4}$$

Damit ergibt sich die Suszeptibilität pro Platz zu

$$\chi_0(T) = \beta \frac{z(\beta)}{1 + 3z(\beta)} \ , \tag{6.5}$$

wobei der Nenner das Ergebnis der Bose-Statistik durch den Ausschluß von Mehrfachbesetzungen einer Anregung für $T \to \infty$ unterdrückt. Der Ausdruck für χ_0 in Gleichung 6.5 ist in beiden Grenzfällen $T \to 0$ und $T \to \infty$ richtig. Im Hochtemperaturbereich erhält man das Curie-Gesetz mit $\chi_0 \approx 1/4T$, und für $T \to 0$ erhält man das Ergebnis der Tieftemperaturnäherung $\chi = \beta z(\beta)$ [28].
Während der statistische Faktor in Gleichung 6.3 die Bose-Statistik korrigiert, berücksichtigt er nicht die Effekte einer Wechselwirkung von Magnonen untereinander. Durch eine Molekularfeldnäherung kann man diese Effekte näherungsweise berücksichtigen [29]. Der Wechselwirkungsterm eines Spins mit den benachbarten Dimeren wird durch $J_{i,i+\delta} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta} \to J_\delta \langle \hat{S}_i^z \rangle \hat{S}_\delta^z = J_\delta m \hat{S}_\delta^z$ genähert. Dadurch ergibt sich ein Beitrag zum effektiven internen Magnetfeld $h_{int} = -mC$ mit $C = J(1-\delta)$ für das eindimensionale System 6.1.
Die Suszeptibilität ist durch $m = \chi h_{ext}$ definiert, während die Magnetisierung durch $m = \chi_0 h_{tot}$ mit $h_{tot} = h_{int} + h_{ext}$ gegeben ist. Eine Umordnung der Terme ergibt die korrigierte Suszeptibilität mit Berücksichtigung der Magnon-Magnon-Wechselwirkung

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 + C\chi_0} = \frac{1}{\chi_0^{-1} + C} \ . \tag{6.6}$$

Gleichung 6.6 eröffnet die Frage, ob nicht allgemein eine Darstellung der Suszeptibilität als Kettenbruch in der Variablen $1/\chi_0$ mit

$$\chi(T) = \cfrac{1}{\chi_0^{-1} + c_1 + \cfrac{c_2}{\chi_0^{-1} + c_3 + \cfrac{c_4}{\ddots}}} \tag{6.7}$$

günstig ist. Um dies zu testen, sollen im folgenden die c_i aus der Hochtemperaturentwicklung der Suszeptibilität für die unfrustrierte Kette bestimmt werden. Dies entspricht dem ungünstigsten Fall, nämlich einer Kette ohne Dimerisierung. Der Vorteil besteht darin, daß die Dispersionsrelation $\omega(k)$ nach [18] exakt bekannt ist.

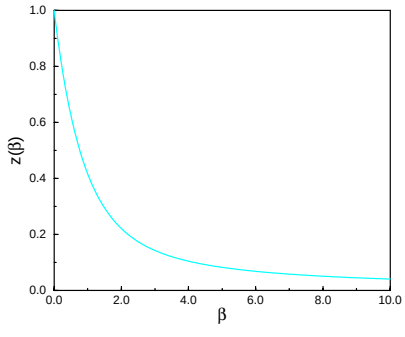


Abbildung 6.1: Darstellung der Zustandssumme in Abhängigkeit von β

In einem ersten Vergleich sollen die Ergebnisse aus der Hochtemperaturentwicklung der unfrustrierten Kette mit Hilfe der neuen Variablen $1/\chi_0$ als Kettenbruch dargestellt werden. Dabei wird zur Berechnung der Zustandssumme $z(\beta)$ die Dispersion der Spinon-Anregung in einer unfrustrierten $S=1/2$-Kette mit

$$\omega(k) = \frac{\pi}{2}\sin(k) \tag{6.8}$$

verwendet [18]. Dadurch ergibt sich die Zustandssumme aus Gleichung 6.4 zu

$$z(\beta) = J_0\left(\frac{1}{2}\beta\pi\right) - \text{Struve}\left(0, \frac{1}{2}\beta\pi\right) \tag{6.9}$$

mit der Besselfunktion erster Art J_0 und der Struve-Funktion nach [30].
In Abbildung 6.1 sieht man das Verhalten der Zustandssumme in Abhängigkeit von β.

Darstellung mittels $\chi_0 = \frac{1}{T}\frac{z(\beta)}{1+3z(\beta)}$

Zur Bestimmung der Koeffizienten c_i der Kettenbruchdarstellung von $\chi(T)$ in der Variablen χ_0 in Gleichung 6.7 wird diese um $\beta = 0$ in einer Taylorreihe entwickelt. Durch Koeffizientenvergleich mit der Suszeptibilität aus der vorangegangenen Hochtemperaturentwicklung (Anhang C) werden die c_i bestimmt. Durch die Information über das Tieftemperaturverhalten in χ_0 soll die Darstellung schon in niedriger Ordnung gute Resultate ergeben. In Abbildung 6.2 sieht man den Vergleich zum exakten Resultat aus dem Bethe-Ansatz.

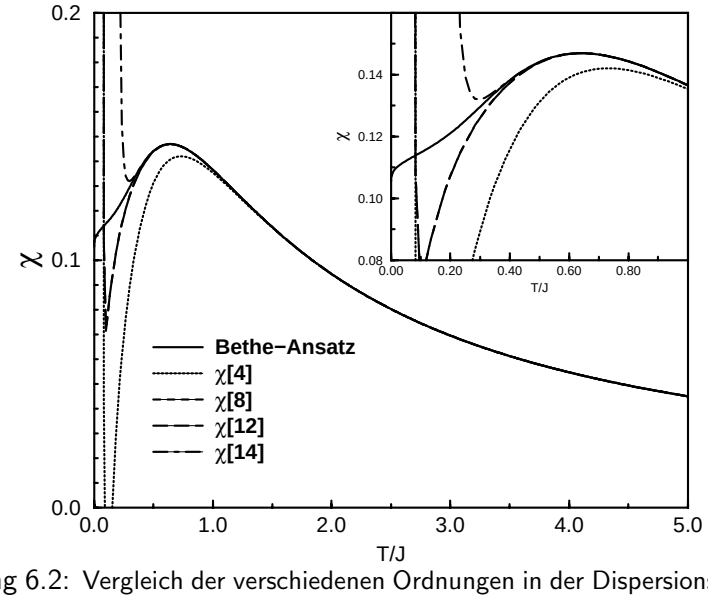


Abbildung 6.2: Vergleich der verschiedenen Ordnungen in der Dispersions-Darstellung in χ_0 der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit exaktem Resultat aus dem Bethe-Ansatz

Schon für niedrige Ordnungen der Kettenbruchdarstellung werden gute Resultate erreicht. Man sieht jedoch, daß für höher werdende Ordnung kaum mehr eine Verbesserung der Ergebnisse erreicht wird. Die $\chi[8]$- und $\chi[12]$-Darstellungen stimmen überein. Erst die $\chi[14]$-Darstellung liefert ein unterschiedliches Ergebnis. Wie man in Abbildung 6.2 erkennt ist keine Verbesserung des Resultats zu sehen. Man kann festhalten, daß vernünftige Aussagen bis $T/J \approx 0.3$ möglich sind. Dieses Ergebnis wird schon in einer sehr niedrigen Ordnung erreicht. Höhere Ordnungen der Kettenbruchdarstellung ergeben keine Verbesserung.

In Abbildung 6.3 ist der Vergleich mit den Darstellungen der Suszeptibilität aus der vorangegangenen Hochtemperaturentwicklung dargestellt. Man erkennt deutlich, daß eine niedrige Ordnung in der Kettenbruchdarstellung der Suszeptibilität mit Hilfe der Dispersion besser ist als eine höhere Ordnung in der Darstellung der Ergebnisse aus der Hochtemperaturentwicklung ($\chi[8]$-Darstellung aus Dispersion gegenüber $\chi[12]$-Darstellung aus Hochtemperaturentwicklung). Trotz dieses guten Ergebnisses in der Darstellung über die Dispersion ist die Darstellung aus der Hochtemperaturentwicklung ($\chi[18]$ mit Extrainformation $\chi(0)$) zu tieferen Temperaturen hin verläßlicher. In letztgenannter Darstellung lassen sich Aussagen bis $T/J \approx 0.2$ machen gegenüber $T/J \approx 0.3$ für die Darstellung über die Dispersion.

Zur Verbesserung der Darstellungen über die Dispersion in hohen Ordnungen wird im nächsten Abschnitt eine neue Variable eingeführt. Es wird als Variable der Kettenbruchdarstellung die Funktion $u(\beta)$ verwendet, mit deren Hilfe das asymptotische Verhalten von χ richtig erfaßt wird. Motiviert wird dies dadurch,

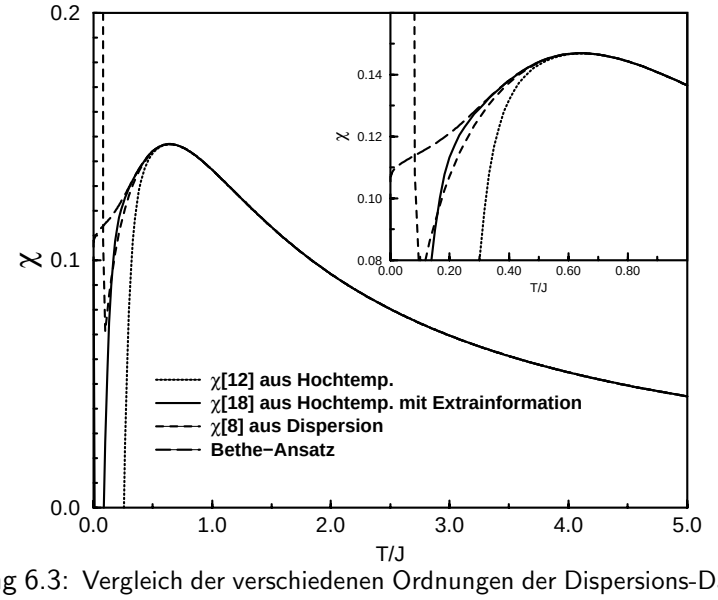


Abbildung 6.3: Vergleich der verschiedenen Ordnungen der Dispersions-Darstellung in χ_0 der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit vorangegangener Hochtemperaturentwicklung

daß die Zustandssumme $z(\beta)$ als verallgemeinerte T-Variable dienen soll, um so die Tieftemperaturinformation miteinbinden zu können.

Darstellung mittels $u = \frac{z(\beta)}{1-z(\beta)}$

Um die Darstellungen in höheren Ordnungen der Kettenbruchdarstellungen zu verbessern, wird eine neue Funktion gesucht, die ähnlich wie χ_0 durch eine geeignete Darstellung beide Grenzwerte $T \to 0$ und $T \to \infty$ von χ richtig beinhaltet. Die Funktion

$$u(\beta) = \frac{z(\beta)}{1 - z(\beta)} \tag{6.10}$$

erfüllt die Bedingungen

$$\lim_{T\to\infty} u \propto T \text{ und}$$
$$u(T = 0) = 0 \ . \tag{6.11}$$

Betrachtet man eine erste Kettenbruchdarstellung in u, die $T\chi(T)$ darstellt mit

$$T\chi(T) = \frac{uc_0}{u + c_1} \ , \tag{6.12}$$

so können die Grenzwerte für $T \to \infty$ und $T \to 0$ durch geeignete Wahl von c_0 und c_1 richtig erfaßt werden. Es ergibt sich $c_0 = c_1 = 1/4$. Für die Bestimmung

der Koeffizienten der Kettenbruchdarstellungen der Suszeptibilität in u

$$T\chi(T) = \cfrac{c_0 u}{u + c_1 + \cfrac{c_2}{u + c_3 + \cfrac{c_4}{\ddots}}} \tag{6.13}$$

wird in gleicher Weise vorgegangen wie im Abschnitt zuvor. Der Koeffizientenvergleich der Taylorentwicklung des Kettenbruchs in u um $\beta = 0$ mit dem Ergebnis aus der Hochtemperaturentwicklung aus Anhang C liefert die c_i. Legitimiert wird dies durch $\lim_{u\to 0}(T\chi/u) = 1$ nach [28].
Diese Eigenschaft könnte man auch noch zusätzlich als Extrainformation in die Kettenbruchdarstellung miteinbinden. Aus folgendem Grund wird dies nicht getan: Nach [28] kennt man das Tieftemperaturverhalten der Suszeptibilität der dimerisierten Kette mit $\chi_{\mathrm{dim}}(T \to 0) = \beta z(\beta)$. Mit der Dispersion der Spinon-Anregung einer unfrustrierten $S = 1/2$-Kette aus Gleichung 6.8 nähert man die Zustandssumme aus Gleichung 6.4 für kleine T zu

$$\begin{aligned} z(\beta) &= \frac{2}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-\beta\frac{\pi}{2}\sin k} dk \\ &\underset{T\to 0}{\approx} \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} e^{-\beta\frac{\pi}{2}k} dk \\ &= T\frac{4}{\pi^2}\Big|_{T\to 0} . \end{aligned} \tag{6.14}$$

Diese Zustandssumme soll für kleine Temperaturen die Suszeptibilität der unfrustrierten $S = 1/2$-Kette beschreiben. Es ergibt sich für die Suszeptibilität im Tieftemperaturbereich die Abschätzung $\chi(T \to 0) \approx 4/\pi^2$. Im Vergleich zum exakten Resultat aus dem Bethe-Ansatz nach Gleichung 5.9 ($\chi(0) = 1/\pi^2$) ist dies eine schlechte Abschätzung, sie würde den Tieftemperaturbereich im vorliegenden Problem falsch beschreiben.

In Abbildung 6.4 ist der Vergleich von verschiedenen Ordnungen der Darstellungen der Suszeptibilität in u mit dem exakten Resultat aus dem Bethe-Ansatz zu sehen. Dabei fällt auch hier auf, daß schon in niedriger Ordnung der Kettenbruchdarstellung sehr gute Resultate erzielt werden ($\chi[8]$-Darstellung). Für höher werdende Ordnungen wird nur eine kleine oder keine Verbesserung der Darstellung erreicht. Allgemein kann man festhalten, daß zuverlässige Aussagen bis $T/J \approx 0.3$ möglich sind. Die $\chi[10]$- und die $\chi[12]$-Darstellung liefern gleiche Resultate und sind in der Abbildung nicht zu unterscheiden. Auf die Darstellung höherer Ordnung wird hier verzichtet, da sie keine Verbesserungen bringen.
Um die durch die Dispersionsdarstellung in u erreichten Ergebnisse mit den bisherigen Ergebnissen aus der Hochtemperaturentwicklung zu vergleichen, sind diese in Abbildung 6.5 dargestellt. Im Vergleich der niedrigen Ordnungen in den

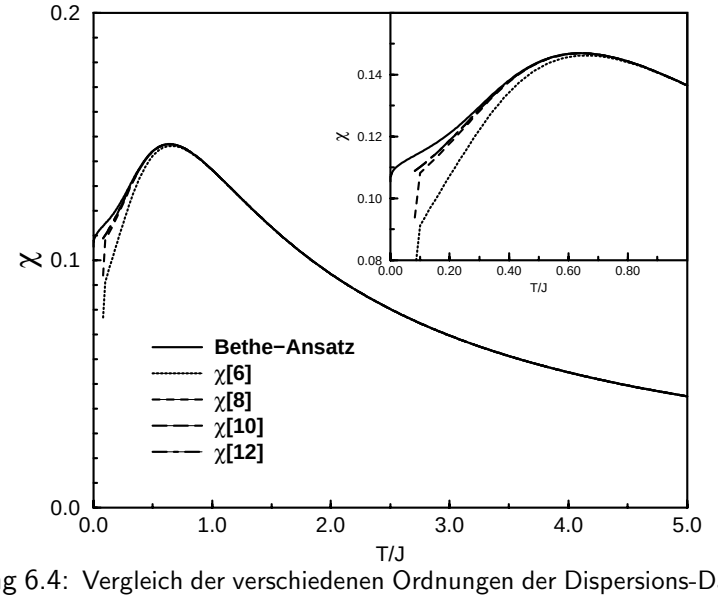


Abbildung 6.4: Vergleich der verschiedenen Ordnungen der Dispersions-Darstellung in u der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit exaktem Resultat aus Bethe-Ansatz

verschiedenen Darstellungen ist die Darstellung über die Dispersion eindeutig die bessere Wahl ($\chi[10]$-Darstellung aus Dispersion gegenüber $\chi[12]$-Darstellung aus Hochtemperaturentwicklung). In hohen Ordnungen bringt die Darstellung über die Dispersion nicht die gewünschte Verbesserung. Die Darstellung der $\chi[18]$-Darstellung mit Extrainformation ist hier etwas überlegen.

Allgemein kann man für die Darstellungen über die Dispersion festhalten, daß sie keine systematischen Verbesserungen für größer werdende Ordnungen liefern. Unter Umständen tritt sogar eine Verschlechterung der Darstellungen auf. Zum Abschätzen des Verhaltens der Suszeptibilität reichen aber schon niedrige Ordnungen in den Kettenbruchdarstellungen aus, um verläßliche Aussagen bis $T/J \approx 0.3$ machen zu können. Dies ist im Vergleich dazu bei den Darstellungen der Hochtemperaturentwicklung erst für hohe Ordnungen möglich. Allgemein ist die vorgestellte Methode eine gute Näherungsmethode für wenige Momente, d.h. Informationen, die mitberücksichtigt werden.

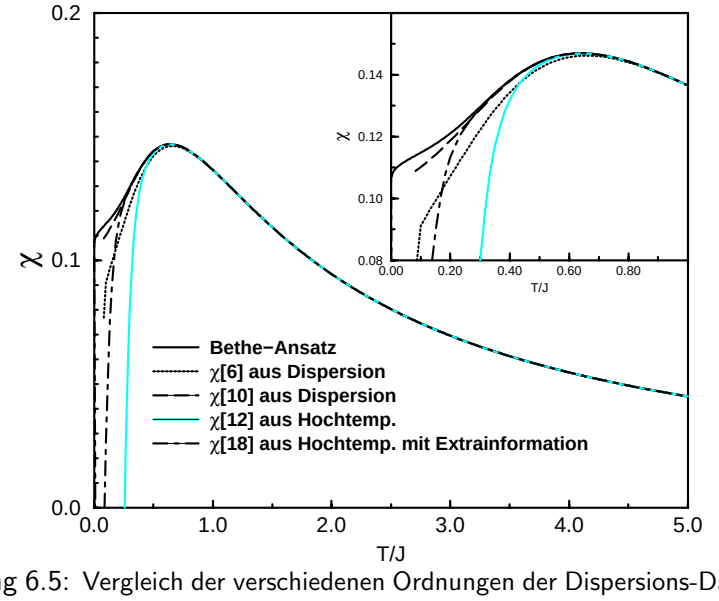


Abbildung 6.5: Vergleich der verschiedenen Ordnungen der Dispersions-Darstellung in u der Suszeptibilität der unfrustrierten Kette mit Darstellungen aus vorangegangener Hochtemperaturentwicklung

7 Effektive Spinmodelle

In diesem Teil der Arbeit soll der Hamiltonoperator für die frustrierte Heisenbergkette 2.1 um die Ankopplung an Gitterschwingungen (Phononen) erweitert werden. Mit Hilfe der Methode der Flußgleichungen [31] wird ein effektives Spinmodell hergeleitet, das die Spin-Phonon-Kopplung implizit berücksichtigt. Durch die Methode der Flußgleichungen wird der Spin-Phonon-Wechselwirkungs-Anteil in den Spinanteil des Hamiltonoperators transformiert, wodurch ein effektives Spinmodell entsteht.
Motiviert wird dieser Zugang durch Untersuchungen an der anorganischen Spin-Peierls-Substanz $CuGeO_3$. Bisherige theoretische Beschreibungen des Spin-Peierls-Übergangs gehen fast ausschließlich von einer adiabatischen Behandlung der Phononen aus [32]. Dabei wird das Subsystem der Phononen als das langsame Subsystem betrachtet im Vergleich zum schnellen Subsystem der magnetischen Wechselwirkung. Ein adiabatischer Zugang ist also gerechtfertigt, wenn die Phononen kleine Energien im Vergleich zum Spin-Subsystem haben. Die Voraussetzung für die Gültigkeit der adiabatischen Näherung ist bei $CuGeO_3$ jedoch nicht erfüllt, da die Phononenenergien von der gleichen Größenordnung sind wie die magnetische Austauschwechselwirkung [33–35]. In der vorliegenden Arbeit wird der umgekehrte Weg eingeschlagen. Das Phononen Subsystem wird als schnell betrachtet im Vergleich zum langsamen Spin-Subsystem. Es handelt sich um eine Erweiterung der Betrachtung aus Ref. [36]. Dort wird die Methode der Flußgleichungen in führender Ordnung in J/ω und in g/ω angewandt.
Im folgenden Abschnitt werden die Grundlagen der Flußgleichungen erläutert. Die danach folgenden Abschnitte beinhalten die Rechnungen und Ergebnisse. Schließlich werden die Ergebnisse mit Resultaten aus numerischen Rechnungen verglichen.

7.1 Grundlagen der Flußgleichungen

Die Berechnung bzw. Lösung eines quantenmechanischen Systems entspricht allgemein der Diagonalisierung des zugehörigen Hamiltonoperators, um durch die Bestimmung der Eigenzustände und Energien die Observablen zu berechnen, die von Interesse sind. Dies ist jedoch meistens, abgesehen von einigen exakt lösbaren Modellen, nicht möglich. In vielen Fällen ist die exakte Diagonalisierung z.B. aufgrund der hohen Dimension des Hilbertraums nicht möglich. Über die Methode der Flußgleichungen wird ein Zugang gewählt, der den Hamiltonoperator in einer Weise transformiert, so daß er sukzessiv eine immer einfachere Gestalt annimmt. Es handelt sich dabei um unitäre Transformationen mit dem Ziel, die Nichtdiagonalelemente des Hamiltonoperators beliebig klein zu machen, so daß am Ende ein Hamiltonoperator in Blockdiagonalgestalt oder im günstigsten Fall sogar in Diagonalgestalt vorliegt.

Allgemein dienen unitäre Transformationen dazu, über Basiswechsel eine Matrix

$\mathbf{A}$ in eine einfachere Gestalt zu überführen. Die unitären Transformationen werden iterativ durchgeführt

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{U}_i \mathbf{A}_{i-1} \mathbf{U}_i^\dagger \ , \tag{7.1}$$

wobei $\mathbf{U}_i$ die unitäre Transformationsmatrix benennt, so daß nach endlich vielen Transformationen die Matrix $\mathbf{A}$ in der gewünschten Gestalt $\mathbf{B}$ vorliegt

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \to \mathbf{A}_1 \to \cdots \to \mathbf{A}_n = \mathbf{B} \ . \tag{7.2}$$

Die Matrix $\mathbf{B}$ läßt sich als

$$\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^\dagger \text{ mit } \mathbf{U} := \prod_{i=1}^{m} \mathbf{U}_i \tag{7.3}$$

darstellen. Aufgrund der Unitarität von $\mathbf{U}$ sind die Eigenwerte λ_i der Matrix $\mathbf{B}$ auch Eigenwerte von $\mathbf{A}$. Die Eigenvektoren von $\mathbf{A}$ sind durch $\mathbf{U}^\dagger v_i$ gegeben, wobei v_i die Eigenvektoren von $\mathbf{B}$ sind.
Durch die Methode der Flußgleichungen wird das eben beschriebene Verfahren erweitert. Anstelle des sukzessiven Anwendens von unitären Transformationen wird die hermitesche Ausgangsmatrix einer kontinuierlichen unitären Transformation unterzogen. Dabei besteht die Transformation aus unendlich vielen infinitesimalen Transformationsschritten. Um dies zu erreichen, wird der Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ als Funktion eines reellen Flußparameters l aufgefaßt

$$\mathbf{H} \to \mathbf{H}(l) \text{ mit } l \in [0 \ldots \infty] \ . \tag{7.4}$$

$\mathbf{H}(0)$ entspricht dem Ausgangsoperator, und $\mathbf{H}(\infty)$ wird den vereinfachten Hamiltonoperator darstellen. Zur Herleitung der infinitesimalen Transformation betrachtet man die l-abhängige Transformation

$$\mathbf{H}(l) = \mathbf{U}(l)\mathbf{H}(0)\mathbf{U}^\dagger(l) \tag{7.5}$$

mit der unitären Transformationsmatrix $\mathbf{U}(l)$. Dadurch ergibt sich der infinitesimale Transformationsschritt zu

$$\mathbf{H}(l + dl) = \mathbf{U}(l + dl)\mathbf{U}^\dagger(l)\mathbf{H}(l)\mathbf{U}(l)\mathbf{U}^\dagger(l + dl) \ . \tag{7.6}$$

Zur Herleitung der Flußgleichung betrachtet man $\eta(l)$, den im allgemeinen l-abhängigen infinitesimalen antihermiteschen Erzeuger von $\mathbf{U}(l)$,

$$\frac{d\mathbf{U}(l)}{dl} = \eta(l)\mathbf{U}(l) \ . \tag{7.7}$$

Entwickelt man $\mathbf{U}(l + dl)$ in erster Ordnung

$$\mathbf{U}(l + dl) = \mathbf{U}(l) + \eta(l)\mathbf{U}(l)dl \ , \tag{7.8}$$

lassen sich die Produkte aus Gleichung 7.6 mit der Ausnutzung der Antihermitizität von $\eta(l)$ als

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(l+dl)\mathbf{U}^{\dagger}(l) &= \mathbf{1} + \eta(l)dl \text{ und} \\ \mathbf{U}(l)\mathbf{U}^{\dagger}(l+dl) &= \mathbf{1} - \eta(l)dl \end{aligned} \tag{7.9}$$

darstellen. Somit ergibt sich Gleichung 7.6 in erster Ornung in dl zu

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(l+dl) &= (\mathbf{1} + \eta(l)dl)\,\mathbf{H}(l)\,(\mathbf{1} - \eta(l)dl) \\ &= \mathbf{H}(l) + [\eta(l), \mathbf{H}(l)]\,dl\ . \end{aligned} \tag{7.10}$$

Eine Umstellung der Terme ergibt die sogenannte Flußgleichung

$$\frac{d\mathbf{H}(l)}{dl} = [\eta(l), \mathbf{H}(l)]\ . \tag{7.11}$$

Die Hauptaufgabe besteht darin, einen geeigneten Erzeuger $\eta(l)$ in Abhängigkeit des Hamiltonoperators zu finden, der über die Flußgleichung 7.11 die Nichtdiagonalelemente von $\mathbf{H}$ beliebig klein werden läßt. Zur Illustration der Methode wird diese auf eine Matrix

$$\mathbf{H}(l) = \begin{pmatrix} \epsilon_1(l) & h_{12}(l) & h_{13}(l) & \\ h_{21}(l) & \epsilon_2(l) & h_{23}(l) & \cdots \\ h_{31}(l) & h_{32}(l) & \epsilon_3(l) & \\ & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \tag{7.12}$$

angewandt. Folgende Wahl des Erzeugers $\eta(l)$ genügt nach [31] der Anforderung der Diagonalisierung von $\mathbf{H}$

$$\eta(l) = \left[\mathbf{H}^{d}(l), \mathbf{H}(l)\right]\ , \tag{7.13}$$

wobei $\mathbf{H}^{d}(l)$ der Diagonalanteil von $\mathbf{H}$ ist. Im weiteren wird auf die explizite Angabe der l-Abhängigkeiten verzichtet. Die Matrixelemente des Erzeugers ergeben sich gemäß Gleichung 7.13 zu

$$\begin{aligned} \eta_{ij} &= \sum_k \epsilon_i \delta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \epsilon_k \delta_{kj} \\ &= (\epsilon_i - \epsilon_j)\, h_{ij}\ . \end{aligned} \tag{7.14}$$

Für die Flußgleichung 7.11 folgt somit

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_{ij}}{\partial l} &= \sum_k \eta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \eta_{kj} \\ &= \sum_k (\epsilon_i + \epsilon_j - 2\epsilon_k)\, h_{ik} h_{kj}\ . \end{aligned} \tag{7.15}$$

Die Forderung des Verschwindens der Nichtdiagonalelemente wird anhand des Transformationsverhaltens des Quadrates der Ausgangsmatrix gezeigt. Dazu betrachtet man die transformationsinvariante Spur von $\mathbf{H}^2$

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp}\mathbf{H}^2 &= \mathrm{konst.} \\ \rightarrow \frac{\partial \mathrm{Sp}\mathbf{H}^2}{\partial l} &= 0 \ . \end{aligned} \tag{7.16}$$

Die Berechnung der Spur liefert

$$\mathrm{Sp}\mathbf{H}^2 = \sum_{i,j} h_{ij}h_{ji} = \sum_i \epsilon_i^2 + \sum_{i,j\neq i} h_{ij}h_{ji} \ . \tag{7.17}$$

Mit Gleichung 7.16 ergibt sich

$$\sum_i \frac{\partial \epsilon_i^2}{\partial l} = -\sum_{i,j\neq i} \frac{\partial}{\partial l}\left(h_{ij}h_{ji}\right) \ . \tag{7.18}$$

Der linke Term in obiger Gleichung läßt sich mit Hilfe von Gleichung 7.15 als

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial \epsilon_i^2}{\partial l} &= 2\sum_i \epsilon_i \frac{\partial \epsilon_i}{\partial l} \\ &= 2\sum_i \left(\epsilon_i \cdot 2 \sum_j \left(\epsilon_i - \epsilon_j\right) h_{ij}h_{ji} \right) \end{aligned} \tag{7.19}$$

schreiben. Umsortieren der Doppelsumme in obiger Gleichung und Einsetzen in Gleichung 7.18 liefert

$$\sum_{i,j\neq i} \frac{\partial}{\partial l}\left(h_{ij}h_{ji}\right) = -2\sum_{i,j} \left(\epsilon_i - \epsilon_j\right)^2 h_{ij}h_{ji} \ . \tag{7.20}$$

Aufgrund der Hermitizität des Ausgangsoperators $\mathbf{H}(0)$, die unter unitären Transformationen erhalten bleibt, beschreibt Gleichung 7.20 die Entwicklung der Betragsquadrate $h_{ij}h_{ji}$ unter der kontinuierlichen Transformation 7.11. Die Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente von $\mathbf{H}(l)$ werden im Limes $l \rightarrow \infty$ kleiner. Ist die rechte Seite in obiger Gleichung Null, so tritt keine weitere Veränderung mehr auf. Das bedeutet, daß die Nichtdiagonalelemente, die Zustände mit gleichen Diagonalelementen verbinden, unter Umständen nicht verschwinden. Allgemein muß man davon ausgehen, daß im Limes $l \rightarrow \infty$ der Ausgangsoperator in einen Operator mit Blockdiagonalgestalt überführt wird. Anhand von Gleichung 7.14 sieht man, daß die verbleibenden Nichtdiagonalelemente h_{ij} keinen Beitrag zu η_{ij} liefern, so daß gilt

$$\lim_{l\rightarrow\infty} \eta(l) = \lim_{l\rightarrow\infty} \left[\mathbf{H}^d(l), \mathbf{H}(l)\right] = 0 \ . \tag{7.21}$$

Dabei ist zu beachten, daß $\mathbf{H}(\infty)$ blockdiagonal ist. Somit steht eine Methode zur Verfügung, die einen gegebenen Hamiltonoperator in Blockdiagonalgestalt und im günstigsten Fall in Diagonalgestalt überführt.
Die eben beschriebene Wahl des Erzeugers ist nur eine Möglichkeit. Allgemein muß η auf das zu lösende Problem zugeschnitten werden. So ist z.B. für Hamiltonoperatoren mit banddiagonaler Gestalt die eben beschriebene Wahl nicht die günstigste, da durch die Transformationen die Banddiagonalität verloren geht [37].

Für das hier betrachtete Problem der Spin-Phonon-Kopplung ist es nicht das Ziel, den Hamiltonoperator möglichst in Diagonalgestalt zu überführen, sondern ihn in Blockstruktur zu transformieren, so daß die direkte Wechselwirkung des Spin-Systems mit den Phononen weggedreht wird unter Erhaltung der Phononenzahl. Schließlich liegt ein effektives Spinmodell und ein effektives Phononenmodell vor, die nicht mehr gekoppelt sind. Dabei wird dieses Modell im speziellen durch die anorganische Spin-Peierls-Substanz $CuGeO_3$ motiviert.

7.2 Spin-Peierls-Phase

Ein Spin-Peierls-System ist ein quasi-eindimensionales antiferromagnetisches Spin-System gekoppelt an Phononen, bei dem unterhalb einer bestimmten Temperatur T_{SP} spontan die Translationssymmetrie gebrochen wird. In adiabatischer Näherung wird die Dimerisierung (siehe Abschnitt 6) durch eine statische Gitterverzerrung beschrieben. Zur Veranschaulichung ist dieser Effekt in Abbildung 7.1 illustriert. Der Hamiltonoperator für dieses System ist in adiabatischer

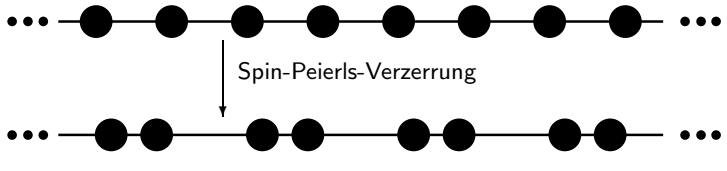


Abbildung 7.1: Dimerisierung eines Spin-Peierls-Systems

Näherung durch

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{N} J\left(1 + (-1)^i \delta\right) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \frac{K_0}{2} N \delta^2 \tag{7.22}$$

gegeben mit der Federkonstanten K_0 und der Verzerrung δ. Die Neigung der Spinkette zur Dimerisierung, also zur Bildung von Singulettpaaren auf benachbarten Gitterlätzen, wird dadurch getrieben, daß der damit verbundene Energiegewinn des magnetischen Systems ($\Delta E \propto \delta^{4/3}$ für unterkritische Frustration

$\alpha \leq \alpha_c$ [32] und $\Delta E \propto \delta$ für überkritische Frustration $\alpha > \alpha_c$) den Energieverlust, der mit der Verzerrung verbunden ist ($\Delta E \propto \delta^2$), überkompensiert. Die Proportionalität des magnetischen Energiegewinns zu δ rührt daher, daß aufgrund der überkritischen Frustration das Spin-System schon alleine, ohne Ankopplung an Gitterschwingungen spontan dimerisiert und einen zweifach entarteten Grundzustand aufweist (Abschnitt 6).

7.3 Nichtadiabatische Beschreibung der Spin-Phonon-Kopplung

Wie oben erwähnt, sollten bei einer adiabatischen Behandlung die Phononenenergien im Vergleich zur Energieskala des Spinsystems klein sein. Experimentelle Daten zu $CuGeO_3$ widersprechen jedoch dieser Annahme. Während bei dieser Substanz J im Bereich von 115 bis 160 K liegt [16, 38], liegen die mit der Dimerisierung in Zusammenhang stehenden Phononenergien bei 313 K und 150 K [33–35]. Daher wird in der vorliegenden Arbeit der umgekehrte Zugang im Vergleich zum adiabatischen Zugang vorgestellt. Das ungestörte, d.h. das nicht an Phononen gekoppelte Spinsystem, weist keine Lücke in der Dispersionsbeziehung auf. Die tiefliegenden Anregungen werden hauptsächlich durch die Wechselwirkung mit den Phononen beeinflußt. Das Phononensystem wird als schnell und das Spin-System als langsam betrachtet, was einer nichtadiabatischen Beschreibung der Phononen entspricht. Das bedeutet für die Energieskalen, daß $\omega \gg J$ gilt. Ein weiteres Resultat aus Betrachtungen der eindimensionalen XY-Kette mit Einsteinphononen zeigt, daß für einen vernünftigen adiabatischen Zugang sogar $\omega < \Delta$ gelten muß, mit der Energielücke Δ für die tiefliegenden Anregungen [39]. Die experimentellen Daten zu $CuGeO_3$ mit $\Delta = 23$K [40] legitimieren somit eher den nichtadiabatischen Zugang zur Beschreibung der Spin-Phonon-Kopplung.

Der Hamiltonoperator für das betrachtete Spin-Peierls-System besteht aus drei Anteilen

$$\mathbf{H} = \underbrace{\mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B}_{\mathbf{H}^d} + \mathbf{H}_{SB} \ , \tag{7.23}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S &= \sum_i \left(J_1 \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}\right) && \text{, dem Spinanteil} \\ \mathbf{H}_B &= \omega \sum_i b_i^\dagger b_i && \text{, dem Phononanteil} \\ \text{und } \mathbf{H}_{SB} &= \sum_i A_i \left(b_i^\dagger + b_i\right) && \text{, dem Spin} - \text{Phonon} - \text{Anteil ,} \end{aligned} \tag{7.24}$$

wobei hier dispersionslose Einstein-Phononen angenommen werden. Dabei be-

schreibt A_i die Ankopplung der Phononen an das Spinsystem mit

$$A_i = g\left(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1}\right) \ . \tag{7.25}$$

Nach Ref. [31] sollte A_i normalgeordnet sein, d.h. $A_i \to A_i - \langle A_i \rangle$, damit beim Vernachlässigen höherer Terme nur ein kleiner Fehler gemacht wird. Durch die Wahl von A_i in obiger Gleichung ist dies durch $\langle A_i \rangle = 0$ in der unverzerrten Phase aufgrund der Translationsinvarianz gewährleistet. In Gleichung 7.24 sind die $b_i^\dagger$ und b_i die bosonischen Erzeuger bzw. Vernichter in zweiter Quantisierung.
Die Erweiterung zu Ref. [36] besteht darin, daß die Kopplungen J_1 und J_2 l-abhängig sind und somit durch die Flußgleichung 7.27 mittransformiert werden. Es werden in der vorliegenden Arbeit zusätzlich höhere Potenzen in J/ω und in g/ω betrachtet.
Die Wahl des Erzeugers $\eta(l)$ ist formal die in Abschnitt 7.1 ausführlich diskutierte mit

$$\eta(l) = \left[\mathbf{H}^d(l), \mathbf{H}\right] \text{ und } \mathbf{H}^d = \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_B \ . \tag{7.26}$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{H}^d$ hier nicht den Diagonalanteil des Operators $\mathbf{H}$ wie in Abschnitt 7.1, sondern die schon bezüglich Spin- und Phononensubsystem entkoppelten Anteile. Um den Spin-Phonon-Term über die Flußgleichungen

$$\frac{d\mathbf{H}(l)}{dl} = [\eta(l), \mathbf{H}(l)] \tag{7.27}$$

in den Spinanteil transformieren zu können, muß dieser Term eine l-Abhängigkeit haben. Dies erfolgt über

$$\mathbf{H}_{SB}(l) = \sum_i \left(T_i(l)b_i^\dagger + T_i^\dagger(l)b_i\right) \tag{7.28}$$

mit der Anfangsbedingung

$$T_i(0) = A_i \ . \tag{7.29}$$

Zur weiteren Vereinfachung der Schreibweise wird für den Kommutator mit dem Spinanteil $\mathbf{H}_S$ der Liouville-Operator $\mathfrak{L}$ eingeführt

$$\mathfrak{L}A := [\mathbf{H}_S, A] \ . \tag{7.30}$$

Mit dieser Schreibweise ergibt sich der Erzeuger zu

$$\begin{aligned}\eta(l) &= \left[\mathbf{H}^d, \mathbf{H}_{SB}\right] \\ &= \sum_i \left\{[\mathfrak{L}(l) + \omega]\, T_i(l)b_i^\dagger + [\mathfrak{L}(l) - \omega]\, T_i^\dagger(l)b_i\right\} \\ &= \sum_i \left\{D_i(l)b_i^\dagger - D_i^\dagger(l)b_i\right\}\end{aligned} \tag{7.31}$$

mit

$$\begin{aligned} D_i(l) &= [\mathfrak{L}(l) + \omega]\, T_i(l) \\ D_i^\dagger(l) &= [-\mathfrak{L}(l) + \omega]\, T_i^\dagger(l) \ . \end{aligned} \tag{7.32}$$

Es ist zu beachten, daß sich durch die l-Abhängigkeit von $\mathbf{H}_S$ eine l-Abhängigkeit von $\mathfrak{L}$ bzw. D_i ergibt. Bis auf die l-Abhängigkeit entspricht Gleichung 7.31 Gleichung 5b aus Ref. [36].
Die Flußgleichung 7.27 führt auf die Berechnung folgender Kommutatoren

$$\frac{d\mathbf{H}(l)}{dl} = \left[\eta(l), \mathbf{H}_{SB}(l)\right] + \left[\eta(l), \mathbf{H}^d(l)\right] \ . \tag{7.33}$$

Die Berechnung des Kommutators $[\eta(l), \mathbf{H}^d(l)]$ ergibt

$$[\eta(l), \mathbf{H}^d(l)] = -\sum_i \left\{ [\mathfrak{L}(l) + \omega]^2\, T_i(l) b_i^\dagger + [\mathfrak{L}(l) - \omega]^2\, T_i^\dagger(l) b_i \right\} \ , \tag{7.34}$$

was wiederum bis auf die l-Abhängigkeit der entsprechenden Gleichung 6 in Ref. [36] entspricht. Der Koeffizientenvergleich mit $d\mathbf{H}/dl$ führt auf die Differentialgleichungen

$$\frac{dT_i(l)}{dl} = -\,[\mathfrak{L}(l) + \omega]^2\, T_i(l) \ . \tag{7.35}$$

Die Anfangsbedingung zu dieser Differentialgleichung lautet $T_i(0) = A_i$. Die formale Lösung ist durch

$$T_i(l) = \mathfrak{T} \exp\left\{ -\int_0^l dl' \left[\mathfrak{L}(l') + \omega\right]^2 \right\} A_i \tag{7.36}$$

gegeben, wobei $\mathfrak{T}$ in Analogie zum Zeitordnungsoperator den l-Ordnungsoperator darstellt.

Da keine geschlossene Lösung für den Ausdruck 7.36 möglich ist, wird ein spezieller Ansatz zur Bestimmung der $T_i(l)$ gesucht. Man wählt einen geeigneten Operatorunterraum des Operatorraumes der exakten Lösung aus. Die Wahl des Operatorunterraumes wird dabei durch die exakte Lösung der analogen Differentialgleichung für $T_i(l)$ aus dem Entwicklungsansatz nach Ref. [36] mit

$$T_i(l) = \exp\left\{ -\,[\mathfrak{L} + \omega]^2\, l \right\} A_i \tag{7.37}$$

eingeschränkt. Dort ist $\mathbf{H}_S$ und somit $\mathfrak{L}$ jedoch nicht l-abhängig. Dies läßt diese formale Lösung zu. Als Ansatz für $T_i(l)$ für das hier vorliegende Problem dient dieselbe Lösung, wobei nur Terme bis zur ersten Ordnung in $\mathfrak{L}$ berücksichtigt werden

$$T_i(l) \approx e^{-l\omega^2}\, (1 - 2l\omega\mathfrak{L})\, A_i \ . \tag{7.38}$$

Somit soll Gleichung 7.35 mit Hilfe der entstehenden Operatoren aus der Ansatzgleichung 7.38 für den entprechenden Operatorunterraum gelöst werden. Es handelt sich um die Operatoren A_i und $\mathfrak{L}A_i$. Dadurch werden nur 2-Spin- und 3-Spin-Terme berücksichtigt, Terme mit höherer Anzahl von Spinprodukten werden vernachlässigt. Durch diese Wahl des Operatorunterraumes ist der Entwicklungsansatz nach Ref. [36] im vorliegenden Ansatz enthalten.

Folgenden Kommutatoren werden zur Berechnung benötigt

$$\begin{aligned} [\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}, \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1}] &= i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i-1}) \\ [\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}, \mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i-1})] &= \frac{i}{2}\,(\mathbf{S}_{i-1}\mathbf{S}_{i+1}-\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1})\ . \end{aligned} \tag{7.39}$$

Es ergibt sich folgender allgemeiner Ausdruck. Dieser Term soll im vorliegenden Problem als Ansatz für $T_i(l)$ dienen

$$\begin{aligned} T_i(l) &= a(l)\,(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}-\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1}) \\ &+ b_1(l)\{i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i-1})\} \\ &+ b_2(l)\{i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2})-i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_{i-2})\} \\ &+ b_3(l)\{i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+3})-i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_{i-3})\} \\ &+ b_4(l)\{i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_{i+2})-i\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i-2})\}\ , \end{aligned} \tag{7.40}$$

mit über die Flußgleichung 7.27 zu bestimmenden l-abhängigen Koeffizienten $a(l), b_1(l), \ldots, b_4(l)$. Es handelt sich um Spinterme, die symmetrisch bezüglich des Platzes i sind. Die Spatprodukte entstehen durch die Berechung von $\mathfrak{L}A_i$. Um die Anfangsbedingung $T_i(0) = A_i$ zu erfüllen, ist $a(0) = g$ und $b_1(0) = \ldots = b_4(0) = 0$ zu wählen.
Um die Differentialgleichung 7.35 explizit aufzustellen, wird die Wirkung von $(\mathfrak{L}+\omega)$ auf $T_i(l)$ in dem ausgewählten Operatorunterraum benötigt. Dazu wird die Wirkung von $(\mathfrak{L}+\omega)$ auf $T_i(l)$ als Matrix M ausgedrückt, so daß sich Gleichung 7.35 als

$$\frac{d\boldsymbol{\nu}(l)}{dl} = -\mathbf{M}^2\boldsymbol{\nu}(l) \tag{7.41}$$

schreiben läßt. Dabei hat $\boldsymbol{\nu}(l)$ als Einträge die einzelnen Koeffizienten aus Gleichung 7.40

$$\boldsymbol{\nu}(l) = [a(l), b_1(l), b_2(l), b_3(l), b_4(l)]^t\ . \tag{7.42}$$

Die Matrix $\mathbf{M}$ wirkt dabei auf die Spinproduktterme der einzelnen Zeilen in Gleichung 7.40, so daß durch $\mathbf{M}\boldsymbol{\nu}$ die Wirkung von $(\mathfrak{L}+\omega)$ auf $T_i(l)$ als Vektor dargestellt wird, wobei die einzelnen Komponenten den Vorfaktoren für die einzelnen Spinproduktterme in Gleichung 7.40 entsprechen, d.h. die erste Komponente von $\mathbf{M}\boldsymbol{\nu}$ enspricht dem Koeffizienten des Spinprodukttermes des ersten Summanden in Gleichung 7.40 usw. Durch Summation der Produkte der entstehenden Komponenten von $\mathbf{M}\boldsymbol{\nu}$ mit den entsprechenden Spinprodukttermen ergibt sich das gesuchte Resultat.

Die Matrix $\mathbf{M}$ hat folgende Darstellung

$$M = \begin{pmatrix} \omega & \frac{1}{2}J_2 - \frac{1}{2}J_1 & \frac{1}{2}J_1 - \frac{1}{2}J_2 & \frac{1}{2}J_2 & \frac{1}{2}J_2 \\ 2J_2 - 2J_1 & \omega & 0 & 0 & 0 \\ J_1 - J_2 & 0 & \omega & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & \omega & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & \omega \end{pmatrix} , \tag{7.43}$$

wobei man beachten muß, daß die Kopplungen J_1 und J_2 l-abhängig sind. Somit läßt sich die Differentialgleichung für die Koeffizienten $a(l), b_1(l), \ldots, b_4(l)$ in einfacher Weise aufstellen. In Anhang E sind die resultierenden Differentialgleichungen explizit angegeben.

Zur Bestimmung der Differentialgleichung für $J_1(l)$ und $J_2(l)$ wird der Kommutator $[\eta(l), \mathbf{H}_{SB}(l)]$ berechnet

$$\begin{aligned} [\eta(l), \mathbf{H}_{SB}(l)] &= \sum_{i,j} \left[D_j(l) b_j^\dagger - D_j^\dagger b_j, T_i(l) b_i^\dagger + T_i^\dagger b_i \right] \\ &= -\sum_i \left(D_i^\dagger(l) T_i(l) + T_i^\dagger(l) D_i(l) \right) && (7.44) \\ &\quad + \sum_{i,j} \left(b_i^\dagger b_j^\dagger \left[D_i(l), T_j(l) \right] + h.c. \right) && (7.45) \\ &\quad + \sum_{i,j} \left\{ b_i^\dagger b_j \left(\left[T_i(l), D_j^\dagger(l) \right] + \left[D_i(l), T_j^\dagger(l) \right] \right) \right\} . && (7.46) \end{aligned}$$

Um aus obiger Gleichung eine Differentialgleichung für den effektiven Spinanteil des Hamiltonoperators zu gewinnen, wird ein mean-field-Zugang verwendet. Dabei werden die quadratischen Bosonenterme durch ihre Erwartungswerte ersetzt. Dies ist in dem Sinne ein systematischer Zugang, als es sich hier um eine Entwicklung in g handelt. Durch die Erwartungswerte werden aufgrund der Wechselwirkung Fluktuationen von der Ordnung g^2 vernachlässigt. Da die vernachlässigten Terme nur in Verbindung mit g^2-Termen auftauchen, ist der Fehler dieses mean-field-Ansatzes von der Ordnung g^4.
Werden die Terme $b_i^\dagger b_j$ durch ihren Erwartungswert $\delta_{ij}\{\exp[\omega/T] - 1\}^{-1}$ ersetzt, und Terme der Form $b_i^\dagger b_j^\dagger$ $(b_i b_j)$ vernachlässigt, da ihr Erwartungswert verschwindet, erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{H}_S(l)}{dl} &= [\eta(l), \mathbf{H}_{SB}(l)] \\ &= \sum_i \left\{ X_i(l) + \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) Y_i(l) \right\} \end{aligned} \tag{7.47}$$

mit

$$X_i(l) = -\frac{1}{2}\left(D_i(l)T_i^\dagger(l) + D_i^\dagger(l)T_i(l) + T_i(l)D_i^\dagger(l) + T_i^\dagger(l)D_i(l)\right) \ , \quad (7.48)$$

$$Y_i(l) = \frac{1}{2}\left(\left[T_i(l), D_i^\dagger(l)\right] + \left[D_i(l), T_i^\dagger(l)\right]\right) \ . \quad (7.49)$$

Nach Summation über i erhält man die Differentialgleichung für die Kopplungen $J_1(l)$ und $J_2(l)$. Dabei werden hier die Anfangsbedingungen $J_1(0) = J_0$ und $J_2(0) = 0$ betrachtet, d.h. eine anfangs unfrustrierte Kette.
Zur Berechnung der Ausdrücke in obiger Gleichung benötigt man folgende Spinproduktterme

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1})\,(\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2})) &= \frac{i}{4}\,(\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad - \frac{1}{4}\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \ , \\
(\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}))\,(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}) &= -\frac{i}{4}\,(\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad - \frac{1}{4}\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \ , \\
[\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2})]^2 &= -\frac{1}{8}\,(\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_{i+2} + \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2}) + \frac{3}{32}
\end{aligned} \quad (7.50)$$

und

$$\begin{aligned}
(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1})\,(\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2})) &= \frac{1}{4}\mathbf{S}_{i-1}\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad - \frac{i}{2}\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_i)\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \ , \\
(\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}))\,(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1}) &= \frac{1}{4}\mathbf{S}_{i-1}\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad + \frac{i}{2}\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_i)\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \ , \\
[\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i-1})\cdot\mathbf{S}_i\,(\mathbf{S}_{i+1}\times\mathbf{S}_{i+2})] &= \frac{1}{8}\,(\mathbf{S}_{i-1}\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad + \frac{i}{8}\,(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})\,(\mathbf{S}_{i-1}\times\mathbf{S}_{i+2}) \\
&\quad - \frac{1}{4}\,[(\mathbf{S}_{i-1}\mathbf{S}_i)\,(\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_{i+2}) + (\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+2})\,(\mathbf{S}_{i-1}\mathbf{S}_{i+1})] \ .
\end{aligned} \quad (7.51)$$

Es ergeben sich nach der Summation die Differentialgleichungen für $J_1(l)$ und $J_2(l)$. Diese sind in Anhang E aufgeführt. Es handelt sich insgesamt um ein Differentialgleichungssystem mit sieben gekoppelten nichtlinearen Gleichungen.

Um diese Ergebnisse mit bereits vorhandenen Resultaten aus DMRG-Rechnungen vergleichen zu können, müssen die gekoppelten Differentialgleichungen aus Anhang E gelöst werden. Da eine exakt Lösung nicht möglich ist, werden die Differentialgleichungen zur Bestimmung des effektiven Spinmodells numerisch gelöst.

7.4 Vergleich mit DMRG

In diesem Abschnitt werden die oben aufgestellten Differentialgleichungen (Anhang E) numerisch gelöst und mit den Resultaten aus DMRG-Rechnungen [41] verglichen. Diese wurden ebenfalls für $T = 0$ im nichtadiabatischen Limes durchgeführt. Zur numerischen Integration der Differentialgleichungen aus Anhang E wurde ein 5. Ordnung Runge-Kutta-Verfahren mit adaptiver Schrittweitenkontrolle verwendet, siehe z.B. Ref. [42]. Die adaptive Schrittweitenkontrolle ist insofern wichtig, da die Integration bezüglich l von 0 bis ∞ verläuft. Für große l-Werte erwartet man keine wesentliche Veränderung der zu berechnenden Funktionen mehr, so daß man mit dieser Methode den Grenzwert $l \to \infty$ sehr gut abschätzen kann.
Hier sollen noch einmal die Anfangsbedingungen der Differentialgleichungen aus Anhang E zusammengefaßt werden.

Anfangsbedingungen:

$$\begin{aligned} a(0) &= g \\ b_1(0) &= 0 \\ b_2(0) &= 0 \\ b_3(0) &= 0 \\ b_4(0) &= 0 \\ J_1(0) &= J_0 \\ J_2(0) &= 0 \end{aligned} \tag{7.52}$$

Die ersten fünf Anfangsbedingungen, die die Kopplung der Phononen an das Spinsystem beschreiben, sind durch $\mathbf{H}(0) = \mathbf{H}$ aus Gleichung 7.29 bestimmt. Die letzten beiden Anfangsbedingungen für die Kopplungen J_1 und J_2 werden in der Weise gewählt, daß das Spinsystem ohne Kopplung an Phononen keine Frustration aufweist. Durch die Methode der Flußgleichungen soll der Effekt der Spin-Phonon-Kopplung auf das Spinsystem untersucht werden. Bezüglich des effektiven Spin-Modells stellt sich die Frage, inwieweit die Spin-Phonon-Kopplung Frustration erzeugt, d.h. inwieweit der Übergang von der undimerisierten Phase in die dimerisierte Phase ($\alpha_{\mathrm{eff}} > \alpha_c \;\to$ D-Phase) durch die induzierte Frustration getrieben wird.
Um einen ersten Eindruck der Funktionsweise der Flußgleichungen zu bekommen, ist in Abbildung 7.2 der Verlauf der Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$, $\ldots$, $b_4(l)$, $J_1(l)$ und $J_2(l)$ für den Parametersatz $g = 0.2$, $T = 0$, $J_1(0) = J_0 = 0.2$ und $\omega = 1$ dargestellt. Man sieht sehr schön, wie die Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$, $\ldots$, $b_4(l)$ „wegfließen“ und für $l \to \infty$ Null werden. Dabei beschreiben diese Funktionen gerade die Ankopplung der Phononen an das Spinsystem. Dafür verändern sich die l-abhängigen Kopplungskonstanten J_1 und J_2. Man erkennt,

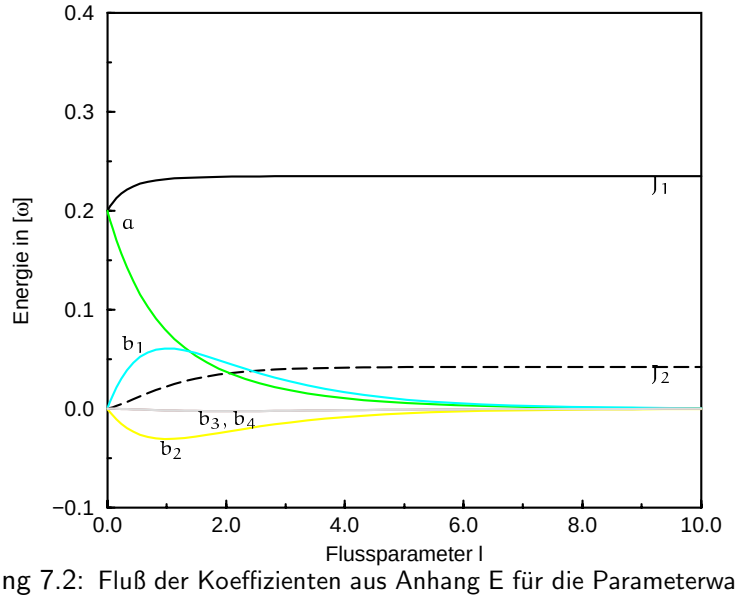


Abbildung 7.2: Fluß der Koeffizienten aus Anhang E für die Parameterwahl $J_0 = 0.2$, $g = 0.2$

wie die kontinuierliche Transformation die Spin-Phonon-Kopplung in ein effektives Spinmodell überführt. Für den gewählten Parametersatz sind schon für sehr kleine l-Werte die Sättigungswerte für die Funktionen erreicht. Dies bedeutet nach Gleichung 7.21, daß $\eta(l)$ durch die Transformation von $\mathbf{H}(l)$ im Limes $l \to \infty$ Null wird. Bei der numerisch durchgeführten Integration wird als Maß für die Sättigung, d.h. für das Erreichen des Limes $l \to \infty$, die Abbruchbedingung $f'(l) < 10^{-7}$ verwendet, wobei $f(l)$ für die l-abhängigen Funktionen in Anhang E steht. Dies ist die maximal mögliche Abbruchbedingung für die verwendeten `float` Variablen, da diese eine Genauigkeit von 10^{-7} besitzen.

Hier und im weiteren wird $\omega = 1$ gesetzt, so daß alle Darstellungen der Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$, ..., $b_4(l)$, $J_1(l)$ und $J_2(l)$ in Einheiten von ω angegeben sind. Da in der vorliegenden Arbeit Grundzustandseigenschaften bei $T = 0$ vorgestellt werden, beschränkt sich die Parameterwahl auf J_0 und g. Es stellt sich heraus, daß für verschiedene Parameter J_0 und g die Sättigungswerte nach obiger Definition des Limes $l \to \infty$ für verschiedene Werte von l erreicht werden. In Abbildung 7.3 ist dieser Sachverhalt illustriert. Die Ursache hierfür ist folgende: Nach Gleichung 7.20 verbinden die Nichtdiagonalelemente unter Umständen Zustände mit gleichen Diagonalelementen oder mit Diagonalelementen, die sich nur sehr wenig voneinander unterscheiden. Dadurch werden durch die Methode der Flußgleichungen die Nichtdiagonalelemente unter Umständen nicht beliebig klein (erstgenannter Fall $\to$ Blockdiagonalisierung) oder sie verschwinden durch die Transformation nur sehr langsam (letztgenannter Fall).

Dieser Sachverhalt beeinflußt durch die Kopplung der Gleichungen alle Funktionen im vorliegenden Problem.

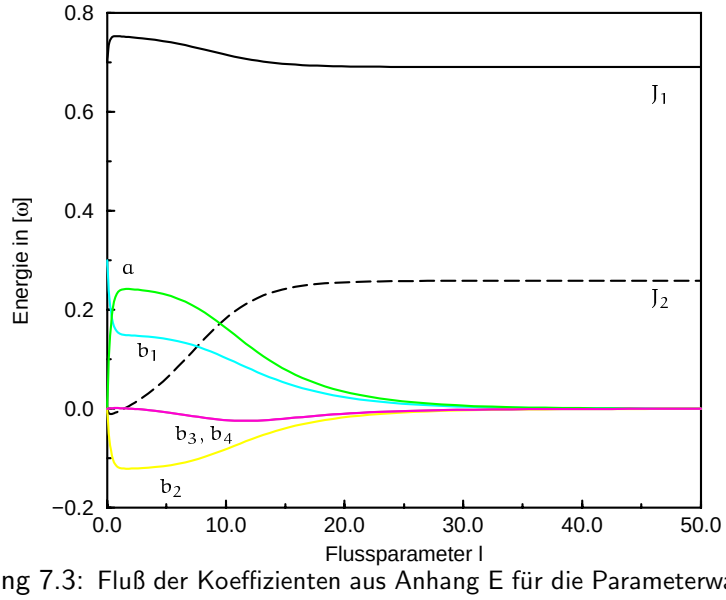


Abbildung 7.3: Fluß der Koeffizienten aus Anhang E für die Parameterwahl $J_0 = 0.7$, $g = 0.3$

In Abbildung 7.4 sind die Ergebnisse der verschiedenen Zugänge dargestellt. Es ist die kritische Spin-Phonon-Kopplung g_c in Abhängigkeit von J_0 in Einheiten von ω aufgetragen. Dabei ist die kritische Spin-Phonon-Kopplung g_c dadurch gekennzeichnet, daß durch diese Kopplungsstärke der Phononen an das Spinsystem eine effektive Spinkopplung mit der Frustrationsstärke $\alpha_c \approx 0.241167$ [12] entsteht. Der grau schattierte Bereich markiert somit den Bereich mit unterkritischer Frustration $\alpha_{eff} < \alpha_c$, in dem das System lückenlose Anregungen besitzt. Oberhalb wird der lückenbehaftete Bereich mit überkritischer Frustration $\alpha_{eff} > \alpha_c$ dargestellt. Die Resultate der DMRG-Rechnung sind gestrichelt dargestellt [41]. Die durchgezogene Linie stellt den Entwicklungsansatz nach Ref. [36] dar. Die gepunktete Linie ist das Ergebnis der hier vorliegenden Arbeit. Für $\omega \gg J_0$ und $\omega \gg g$, also im oben beschriebenen nichtadiabatischen Regime, bei dem die Phononen im Vergleich zum magnetischen System schnell sind, stimmen die hier erzielten Ergebnisse mit den Ergebnissen der anderen Darstellungen überein. Dies war zu erwarten, da für g/ω und J_0/ω klein der Entwicklungsansatz exakt wird, und der hier verfolgte Ansatz so gewählt wurde, daß er den Entwicklungsansatz aus Ref. [36] enthält. Im Bereich $J_0/\omega \in [0.1, 0.4]$ liefert die hier vorgestellte Lösung der Flußgleichung im Raum lokaler Operatoren eine Verbesserung gegenüber dem Entwicklungsansatz. Jedoch ist der vorliegende Ansatz für $J_0/\omega > 0.5$ nicht mehr geeignet. Hier brechen die Ergebnisse im Vergleich zu den anderen Darstellungen nach unten aus und enden an dem mit dem Pfeil gekennzeichneten Punkt.

Um dieses Ergebnis verstehen zu können, wird eine Eigenschaft der hier betrachteten Differentialgleichungen näher untersucht. Man betrachtet dazu die

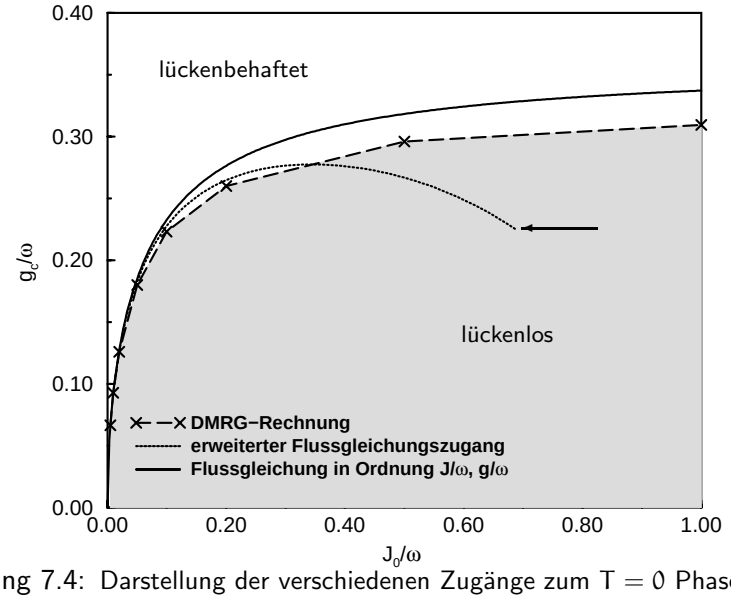


Abbildung 7.4: Darstellung der verschiedenen Zugänge zum $T = 0$ Phasendiagramm der antiferromagnetischen Spin-Peierls-Kette, mit Einstein-Phononen. Dabei stellt der grau schattierte Bereich das lückenlose System und der Bereich darüber das lückenbehaftete System dar. Die DMRG-Daten stammen aus Ref. [41]

Eigenwerte λ_i der Matrix $\mathbf{M}$ aus Gleichung 7.43

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \omega - \frac{1}{2}\sqrt{6J_1(l)^2 - 12J_2(l)J_1(l) + 10J_2(l)^2} \\ \lambda_2 &= \omega + \frac{1}{2}\sqrt{6J_1(l)^2 - 12J_2(l)J_1(l) + 10J_2(l)^2} \\ \lambda_{3,4,5} &= \omega \ . \end{aligned} \tag{7.53}$$

Über die Matrix $\mathbf{M}$ werden die Flußgleichungen für die Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$, $\ldots$, $b_4(l)$ nach Gleichung 7.41 beschrieben. Diese Funktionen beschreiben die Kopplung der Phononen an das Spinsystem und sollen mit Hilfe der Flußgleichung zum Verschwinden gebracht werden. Die Eigenwerte von $\mathbf{M}^2$ sind λ_i^2, $i = 1, \ldots, 5$, mit den Eigenwerten λ_i von $\mathbf{M}$.
Die Lösungen der Differentialgleichung 7.41 sind $\propto \exp(-\lambda_i^2 l)$ für die Anteile in den jeweiligen Eigenvektoren, wenn man annimmt, daß die Kopplungsfunktionen $J_1(l)$ und $J_2(l)$ konstant sind, so daß die Eigenwerte und Eigenvektoren als l-unabhängig betrachtet werden können. Man kann so ablesen, wie stark diese Kopplungsanteile für größer werdendes l unterdrückt werden. Dies ist dann nicht mehr gewährleistet, wenn $\lambda_i = 0$ oder λ_i sehr klein ist. In diesen Fällen ist es möglich, daß die Funktionen nicht exponentiell mit l kleiner werden. Dies bedeutet für die kontinuierliche Transformation im betrachteten l-Intervall eine Art Stillstand.
Um diesen Sachverhalt zu verdeutlichen, sind in Abbildung 7.5 die Funktionen $J_1(l)$, $J_2(l)$ und der Eigenwert λ_1 aus Gleichung 7.53 für $J_0 = 0.7$ und zwei ver-

schiedene g-Werte dargestellt. Der hier beschriebene Effekt tritt für $J_0 \geq 0.7$

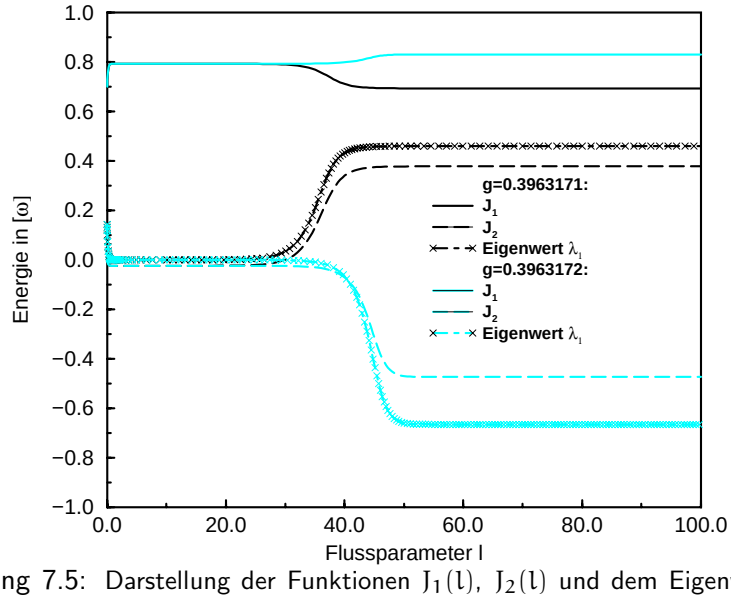


Abbildung 7.5: Darstellung der Funktionen $J_1(l)$, $J_2(l)$ und dem Eigenwert λ_1 aus Gleichung 7.53 mit $J_0 = 0.7$ und verschiedenen g-Werten

zutage. In Abbildung 7.4 ist daher das Ergebnis der hier vorliegenden Rechnungen nur bis $J_0 < 0.7$ illustriert. Die zwei Werte von g unterscheiden sich nur um 10^{-7}. Dies entspricht der maximalen Genauigkeit der verwendeten `float` Variablen. Man erkennt deutlich, daß für beide Werte von g die jeweiligen Eigenwerte λ_1 und die Kopplungen $J_1(l)$ und $J_2(l)$ im Bereich $1 < l < 30$ nahezu konstant und jeweils nahezu gleich sind. Der Eigenwert λ_1 ist dabei ungefähr Null. Ab einem bestimmten Wert für l ändert sich die Situation sehr schnell. Abhängig von g werden die Eigenwerte positiv oder negativ und ändern das Verhalten der Kopplungen $J_1(l)$ und $J_2(l)$ qualitativ. Abhängig vom Vorzeichen des Eigenwertes wird die Kopplung $J_2(l)$ positiv oder negativ.
Es handelt sich hier um einen Umschlagspunkt $g_U \approx 0.3963172$ für $J_0 = 0.7$, der für Werte $g \geq g_U$ negative Übernächstnachbar-Kopplung und für Werte $g < g_U$ eine positive Frustration bewirkt. Eine negative Frustration bedeutet die Änderung des zugrundeliegenden physikalischen Bildes. Könnte man den kritischen Wert g_U exakt berechnen, so würde der Eigenwert λ_1 vermutlich exakt Null sein, und es ergäbe sich keine Veränderung mehr im Laufe der Transformation, wie dies für Werte von $g \neq g_U$ in Abbildung 7.5 zu sehen ist.
In Abbildung 7.6 sieht man den Verlauf der Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$,..., $b_4(l)$ (vgl. Gleichung 7.41) mit $J_0 = 0.7$ und verschiedenen g-Werten. Auch hier bleiben diese Funktionen in dem oben erwähnten Bereich nahezu konstant, bis sie sich ab einem bestimmten l-Wert verändern und ihren Sättigungswert von Null annehmen.
Es bleibt die Frage offen, ob der Umschlagpunkt g_U einen physikalischen Hintergrund hat, oder ob die Ursache alleine in einem ungünstig gewählten Ansatz für

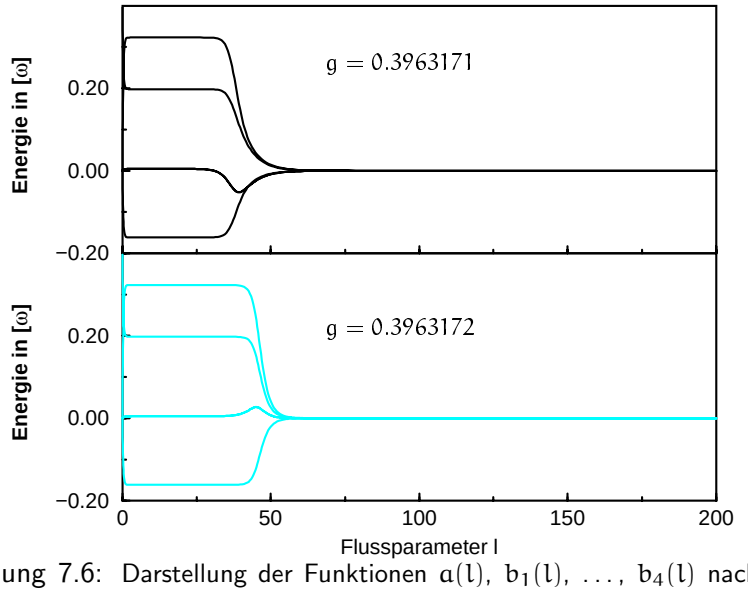


Abbildung 7.6: Darstellung der Funktionen $a(l)$, $b_1(l)$, ..., $b_4(l)$ nach Gleichung 7.41 mit $J_0 = 0.7$ und verschiedenen g-Werten

$T_i(l)$ (Gleichung 7.40) liegt. Dies würde bedeuten, daß es sich um einen Effekt handelt, der relevante Terme in dem gewählten Ansatz nicht berücksichtigt.

Im Rahmen der vorliegenden Rechnung trifft das Bild der Dimerisierung durch Frustration jenseits des Umschlagpunktes g_U bei $J_0 = 0.7$ nicht mehr zu. Wie bereits erwähnt, ist es noch unklar, ob dieser Umschlagpunkt durch eine übermäßige Vereinfachung induziert wird, oder eine qualitative Änderung der zugrundeliegenden Physik signalisiert. Das Grundbild der hier vorliegenden Rechnungen ist richtig, da gegenüber des Entwicklungsansatzes im oben angegebenen Bereich eine Verbesserung auftritt. Weitere Untersuchungen bezüglich des Umschlagpunktes sind erforderlich, um dessen Ursache (physikalisch oder Artefakte der Näherung) zu klären.

8 Fazit und Ausblick

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile. Im ersten Teil der Arbeit wird die Hochtemperaturentwicklung von isotropen $S=1/2$-Ketten untersucht. Für die unfrustrierte Kette können Ergebnisse bis zur 16. Ordnung und für die frustrierte Kette bis zur 10. Ordnung erzielt werden. Dabei handelt es sich um Entwicklungen, die bis zur berechneten Ordnung absolut exakt sind und in Form eines analytischen Ausdrucks vorliegen. Es hat sich gezeigt, daß durch die Darstellung dieser Polynome über eine Padé-Approximation sehr gute Resultate erzielt werden können, die durch das Einbinden von Informationen über den Tieftemperaturbereich der jeweiligen Größe nochmals verbessert werden können. Die Ergebnisse lassen dadurch für die unfrustrierte Kette zutreffende Aussagen über die jeweilige physikalische Größe bis zu einer Temperatur von $T \approx 0.2J$ und für die frustrierte Kette bis $T \approx 0.3J$ zu. Das Maximum der Suszeptibilität und der spezifischen Wärme wird für einen Vergleich mit experimentellen Daten ausreichend beschrieben. Besonders für die frustrierte Kette sind dies sehr gute Resultate, wenn man bedenkt, daß im Vergleich zur unfrustrierten Kette die Ergebnisse nur bis zur 10. Ordnung vorliegen. Allgemein muß man festhalten, daß die Padé-Approximationen sehr gute Darstellungen der Ergebnisse aus der Hochtemperaturentwicklung bewirken.
Ausblickend könnte man versuchen, über die Methode der „Differential Approximants“ [43], die eine Erweiterung der Padé-Approximation darstellt, die Ergebnisse speziell im Tieftemperaturbereich weiter zu verbessern. Ein weiterer interessanter Aspekt ist die Erweiterung der Berechnungen auf zweidimensionale Systeme. Da man bei den hier vorliegenden Ergebnissen schon an die Grenze der Kapazität der zur Verfügung stehenden Computer stößt, wird es schwierig, über die hier verwendeten Methoden zufriedenstellende Darstellungen der erreichbaren Ordnung zu erzielen. Eine geeignetere Methode ist die Berechnung mit Hilfe des Theorems zusammenhängender Cluster [15], da dadurch nur Subsysteme betrachtet werden müssen, die durch geeignete Summation das globale System beschreiben.
Die Darstellungen der Suszeptibilität über Dispersionsdaten erbringen schon in niedriger Ordnung sehr gute Ergebnisse , d.h. nur wenige Informationen reichen aus, um vernünftige Aussagen bis zu einer Temperatur von $T \approx 0.3J$ machen zu können. Hohe Ordnungen in den Darstellungen liefern kaum eine Verbesserung. Das Konzept der verallgemeinerten T-Variablen, die beide Grenzwerte $T \to 0$ und $\beta \to 0$ beeinhaltet, erweist sich als eine sehr gute Methode, erste Abschätzungen der Suszeptibilität zu erreichen. Weitere Versuche, die Darstellungen durch andere verallgemeinerte Variablen zu verbessern, sind wünschenswert, obwohl es Anzeichen gibt, daß keine beliebig gute Darstellung erreicht werden kann.

Im zweiten Teil der Arbeit wird die Methode der Flußgleichungen vorgestellt. Das Ziel, die Spin-Phonon-Kopplung auf ein effektives Spinmodell abzubilden,

wird erreicht. Anhand der Grafiken zum Transformationsverhalten der Spin-Phonon-Kopplungsterme und der Spinkopplungsterme wird die Wirkungsweise der Flußgleichungen illustriert. Es wird gezeigt, wie im effektiven Spinsystem durch Ankopplung an Phononen langreichweitige Spinkopplungen erzeugt werden. Der Vergleich der Ergebnisse zur kritischen Spin-Phonon-Kopplung g_c in Abhängigkeit der ungestörten Nächstnachbar-Kopplung J_0 mit dem Entwicklungsansatz nach Ref. [36] und DMRG-Rechnungen zeigt für J_0/ω und g/ω klein eine Verbesserung zum Entwicklungsansatz. Im Bereich $J_0 \in [0, 0.4]$ wird somit deutlich, daß das Konzept des Zuganges richtig ist. Für Werte von $J_0/\omega > 0.4$ tritt die gewünschte Verbesserung nicht ein. Hier treten Effekte auf, die noch einer genaueren Untersuchung bedürfen. Es ist noch unklar, ob es sich um eine ungeeignete Näherung des Operatorunterraumes für $T_i(l)$ handelt, oder ob ein qualitativer Wechsel in der zugrundeliegenden Physik stattfindet.
Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird auf die $T = 0$ Eigenschaften des Systems eingegangen, da hierfür ein guter Vergleich zu numerischen Daten möglich ist. Da die Temperatur als Parameter in den Gleichungen enthalten ist, lassen sich als unmittelbare Erweiterung die Eigenschaften des Systems auch für endliche Temperaturen untersuchen. Mit der Kombination der Ergebnisse aus dem Flußgleichungszugang und den Ergebnissen aus der Hochtemperaturentwicklung lassen sich z.B. speziell für $CuGeO_3$ die Resultate zur genaueren Bestimmung der Modellparameter an experimentelle Daten anpassen. Ein Beispiel hierfür sind die effektiven temperaturabhängigen Spinkopplungen aus dem zweiten Teil der Arbeit, die man in die Darstellung der Suszeptibilität aus dem ersten Teil miteinbindet.

A Matrix des Heisenbergoperators

Zur Kodierung der Wirkungsweise des Hamiltonoperators 2.1 auf das erweiterte System wird dieser in der Form

$$\mathbf{H} = J \sum_{n=1}^{N} \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n+1} = J \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^+ \hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_{n+1}^+ \right) + \hat{S}_n^z \hat{S}_{n+1}^z \right) \tag{A.1}$$

für die unfrustrierte Kette dargestellt. Die möglichen Zustände zweier benachbarter Plätze auf der realen und virtuellen Kette sind mit

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_r \downarrow_v\rangle - |\downarrow_r \uparrow_v\rangle \right) \ , \\ T_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_r \downarrow_v\rangle + |\downarrow_r \uparrow_v\rangle \right) \ , \\ T_{-1} &= |\downarrow_r \downarrow_v\rangle \ , \\ T_{+1} &= |\uparrow_r \uparrow_v\rangle \end{aligned} \tag{A.2}$$

bezeichnet, nämlich dem Singulettzustand und den drei Triplettzuständen.

Damit ergibt sich die folgende Matrix für die Wirkung der einzelnen Summanden des Hamiltonoperators A.1 auf die $4 \times 4 = 16$ möglichen Zustandskombinationen. Dabei bezeichnen die hochgestellten Indizes die Kettenplätze.

angewandt auf	$\frac{1}{2}\left(\hat{S}^+_n\hat{S}^-_{n+1} + \hat{S}^-_n\hat{S}^+_{n+1}\right)$	$\hat{S}^z_n\hat{S}^z_{n+1}$
S^nS^{n+1}	$-\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_{+1} + T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}\right)$	$\frac{1}{4}T^n_0T^{n+1}_0$
$S^nT^{n+1}_0$	$\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_{+1} - T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}\right)$	$\frac{1}{4}T^n_0S^{n+1}$
$T^n_0S^{n+1}$	$-\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_{+1} - T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}\right)$	$\frac{1}{4}S^nT^{n+1}_0$
$S^nT^{n+1}_{-1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_0 + T^n_{-1}S^{n+1}\right)$	$-\frac{1}{4}T^n_0T^{n+1}_{-1}$
$T^n_{-1}S^{n+1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_{-1} + S^nT^{n+1}_{-1}\right)$	$-\frac{1}{4}T^n_{-1}T^{n+1}_0$
$S^nT^{n+1}_{+1}$	$-\frac{1}{4}\left(T^n_{+1}T^{n+1}_0 - T^n_{+1}S^{n+1}\right)$	$\frac{1}{4}T^n_0T^{n+1}_{+1}$
$T^n_{+1}S^{n+1}$	$-\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_{+1} - S^nT^{n+1}_{+1}\right)$	$\frac{1}{4}T^n_{+1}T^{n+1}_0$
$T^n_0T^{n+1}_0$	$\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_{+1} + T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}\right)$	$\frac{1}{4}S^nS^{n+1}$
$T^n_0T^{n+1}_{-1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_{-1}T^{n+1}_0 + T^n_{-1}S^{n+1}\right)$	$-\frac{1}{4}S^nT^{n+1}_{-1}$
$T^n_{-1}T^{n+1}_0$	$\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_{-1} + S^nT^{n+1}_{-1}\right)$	$-\frac{1}{4}T^n_{-1}S^{n+1}$
$T^n_0T^{n+1}_{+1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_{+1}T^{n+1}_0 - T^n_{+1}S^{n+1}\right)$	$\frac{1}{4}S^nT^{n+1}_{+1}$
$T^n_{+1}T^{n+1}_0$	$\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_{+1} - S^nT^{n+1}_{+1}\right)$	$\frac{1}{4}T^n_{+1}S^{n+1}$
$T^n_{-1}T^{n+1}_{-1}$	0	$\frac{1}{4}T^n_{-1}T^{n+1}_{-1}$
$T^n_{-1}T^{n+1}_{+1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_0 - T^n_0S^{n+1} + S^nT^{n+1}_0 - S^nS^{n+1}\right)$	$-\frac{1}{4}T^n_{-1}T^{n+1}_{+1}$
$T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}$	$\frac{1}{4}\left(T^n_0T^{n+1}_0 + T^n_0S^{n+1} - S^nT^{n+1}_0 - S^nS^{n+1}\right)$	$-\frac{1}{4}T^n_{+1}T^{n+1}_{-1}$
$T^n_{+1}T^{n+1}_{+1}$	0	$\frac{1}{4}T^n_{+1}T^{n+1}_{+1}$

Für die übernächsten Nachbar-Terme gilt die gleiche Matrix mit der Ersetzung $n+1 \to n+2$.

B Daten nach linked-cluster-Methode

Diese Daten stammen aus Berechnungen nach der Methode zusammenhängender Cluster [15], durchgeführt von N. Elstner [44]. Dabei wurden die Ergebnisse bis zur 16. Ordnung exakt berechnet und alle weiteren Ordnungen durch günstige Kürzungen exakt fortgeführt.

$$
\begin{aligned}
\chi(T) &= \frac{1}{4}\frac{1}{T} - \frac{1}{8}\frac{1}{T^2} + \frac{1}{96}\frac{1}{T^4} + \frac{5}{1536}\frac{1}{T^5} - \frac{7}{5120}\frac{1}{T^6} - \frac{133}{122880}\frac{1}{T^7} + \frac{1}{16128}\frac{1}{T^8} \\
&+ \frac{1269}{4587520}\frac{1}{T^9} + \frac{3737}{74317824}\frac{1}{T^{10}} - \frac{339691}{5945425920}\frac{1}{T^{11}} - \frac{1428209}{54499737600}\frac{1}{T^{12}} \\
&+ \frac{18710029}{2242274918400}\frac{1}{T^{13}} + \frac{7045849}{809710387200}\frac{1}{T^{14}} - \frac{358847}{3957275492352}\frac{1}{T^{15}} \\
&- \frac{65174099663}{28566582460416000}\frac{1}{T^{16}} - \frac{258645079463}{498616712036352000}\frac{1}{T^{17}} \\
&+ \frac{1228965600979}{2590036809744384000}\frac{1}{T^{18}} + \frac{1116582102301823}{44755836072382955520 00}\frac{1}{T^{19}} \\
&- \frac{479324499596581}{728880758893093847 0400}\frac{1}{T^{20}} - \frac{5295672430596073}{6478940079049723084 8000}\frac{1}{T^{21}} \\
&- \frac{4017679877443439}{1948099482859723554816000}\frac{1}{T^{22}} \\
&+ \frac{9717209629565426423}{4571540119777484608634 88000}\frac{1}{T^{23}}
\end{aligned}
\tag{B.1}
$$

C Suszeptibilitäten

Unfrustrierte Kette:

$$
\begin{aligned}
\chi(T) &= \frac{1}{4}\frac{1}{T} - \frac{1}{8}\frac{1}{T^2} + \frac{1}{96}\frac{1}{T^4} + \frac{5}{1536}\frac{1}{T^5} - \frac{7}{5120}\frac{1}{T^6} \\
&- \frac{133}{122880}\frac{1}{T^7} + \frac{1}{16128}\frac{1}{T^8} + \frac{1269}{4587520}\frac{1}{T^9} + \frac{3737}{74317824}\frac{1}{T^{10}} \\
&- \frac{339691}{5945425920}\frac{1}{T^{11}} - \frac{1428209}{54499737600}\frac{1}{T^{12}} + \frac{18710029}{2242274918400}\frac{1}{T^{13}} \\
&+ \frac{7045849}{809710387200}\frac{1}{T^{14}} - \frac{358847}{3957275492352}\frac{1}{T^{15}} - \frac{65174099663}{28566582460416000}\frac{1}{T^{16}} \\
&- \frac{258645079463}{498616712036352000}\frac{1}{T^{17}}
\end{aligned}
\tag{C.1}
$$

Frustrierte Kette:

$$
\begin{aligned}
\chi(T) &= \frac{1}{4}\frac{1}{T} + \left(-\frac{1}{8} - \frac{1}{8}\alpha\right)\frac{1}{T^2} + \frac{1}{8}\frac{\alpha}{T^3} + \left(\frac{1}{96} + \frac{1}{128}\alpha - \frac{1}{32}\alpha^2 + \frac{1}{96}\alpha^3\right)\frac{1}{T^4} \\
&+ \left(\frac{5}{1536} - \frac{23}{768}\alpha + \frac{1}{512}\alpha^2 - \frac{1}{96}\alpha^3 + \frac{5}{1536}\alpha^4\right)\frac{1}{T^5} \\
&+ \left(-\frac{7}{5120} - \frac{49}{6144}\alpha + \frac{37}{1536}\alpha^2 - \frac{1}{128}\alpha^3 + \frac{1}{512}\alpha^4 - \frac{7}{5120}\alpha^5\right)\frac{1}{T^6} \\
&+ \left(-\frac{133}{122880} + \frac{9}{1280}\alpha + \frac{221}{61440}\alpha^2 - \frac{163}{92160}\alpha^3 + \frac{7}{15360}\alpha^4 + \frac{23}{7680}\alpha^5\right. \\
&- \left.\frac{133}{122880}\alpha^6\right)\frac{1}{T^7} + \left(+\frac{1}{16128}\frac{5863}{1474560}\alpha - \frac{805}{73728}\alpha^2 + \frac{3023}{737280}\alpha^3\right. \\
&- \left.\frac{381}{81920}\alpha^4 + \frac{943}{368640}\alpha^5 + \frac{67}{368640}\alpha^6 + \frac{1}{16128}\alpha^7\right)\frac{1}{T^8} + \left(+\frac{1269}{4587520}\right. \\
&- \frac{23629}{20643840}\alpha - \frac{58651}{13762560}\alpha^2 + \frac{28751}{5160960}\alpha^3 - \frac{59}{20160}\alpha^4 - \frac{877}{1290240}\alpha^5 + \frac{5389}{20643840}\alpha^6 \\
&- \left.\frac{1271}{1720320}\alpha^7 + \frac{1269}{4587520}\alpha^8\right)\frac{1}{T^9} \\
&+ \left(\frac{3737}{74317824} - \frac{34337}{23592960}\alpha + \frac{14125}{4128768}\alpha^2 - \frac{1249}{35389440}\alpha^3\right. \\
&+ \frac{317}{229376}\alpha^4 - \frac{969}{655360}\alpha^5 + \frac{93463}{61931520}\alpha^6 - \frac{67097}{82575360}\alpha^7 \\
&- \left.\frac{361}{1720320}\alpha^8 + \frac{3737}{74317824}\alpha^9\right)\frac{1}{T^{10}} + \left(-\frac{22843}{1486356480}\alpha - \frac{339691}{5945425920}\right. \\
&+ \frac{15205963}{5945425920}\alpha^2 - \frac{311903}{82575360}\alpha^3 + \frac{9659}{3932160}\alpha^4 \\
&- \frac{1177787}{825753600}\alpha^5 + \frac{599639}{594542592}\alpha^6 + \frac{791221}{1486356480}\alpha^7 - \frac{367481}{1486356480}\alpha^8 \\
&+ \left.\frac{22433}{148635648}\alpha^9 - \frac{339691}{5945425920}\alpha^{10}\right)\frac{1}{T^{11}} \qquad \text{(C.2)}
\end{aligned}
$$

D Zustandssummen

Unfrustrierte Kette (16 Plätze):

$$
\begin{aligned}
Z(T) &= 1 + \frac{3}{2}\frac{1}{T^2} + \frac{1}{4}\frac{1}{T^3} + \frac{67}{64}\frac{1}{T^4} + \frac{21}{64}\frac{1}{T^5} + \frac{1227}{2560}\frac{1}{T^6} \\
&+ \frac{3071}{15360}\frac{1}{T^7} + \frac{191061}{1146880}\frac{1}{T^8} + \frac{1191361}{15482880}\frac{1}{T^9} + \frac{4110211}{88473600}\frac{1}{T^{10}} \\
&+ \frac{8800783}{412876800}\frac{1}{T^{11}} + \frac{6897705817}{653996851200}\frac{1}{T^{12}} + \frac{330892183}{72666316800}\frac{1}{T^{13}} + \frac{9432253919}{4809188966400}\frac{1}{T^{14}} \\
&+ \frac{412766341177}{529010786304000}\frac{1}{T^{15}} + \frac{13765327136591}{457065319366656000}\frac{1}{T^{16}} \qquad \text{(D.1)}
\end{aligned}
$$

Frustrierte Kette (20 Plätze):

$$
\begin{aligned}
Z_\alpha(T) &= 1 + \frac{1}{2}\left(\frac{15}{4} + \frac{15}{4}\alpha^2\right)\frac{1}{T^2} - \frac{1}{6}\left(-\frac{15}{8} + \frac{45}{8}\alpha - \frac{15}{8}\alpha^3\right)\frac{1}{T^3} \\
&+ \frac{1}{24}\left(\frac{1275}{32} - \frac{15}{4}\alpha + \frac{645}{8}\alpha^2 + \frac{1275}{32}\alpha^4\right)\frac{1}{T^4} \\
&- \frac{1}{120}\left(-\frac{2025}{32} + \frac{375}{2}\alpha - \frac{525}{8}\alpha^2 + \frac{2025}{16}\alpha^3 - \frac{2025}{32}\alpha^5\right)\frac{1}{T^5} \\
&+ \frac{1}{720}\left(\frac{44595}{64} - \frac{5805}{16}\alpha + \frac{147465}{64}\alpha^2 - \frac{1995}{16}\alpha^3 + \frac{239175}{128}\alpha^4 + \frac{44595}{64}\alpha^6\right)\frac{1}{T^6} \\
&- \frac{1}{5040}\Bigg(-\frac{135345}{64} + \frac{818895}{128}\alpha - \frac{161175}{32}\alpha^2 + \frac{2700075}{256}\alpha^3 - \frac{531405}{256}\alpha^4 \\
&+ \frac{265125}{128}\alpha^5 - \frac{135345}{64}\alpha^7\Bigg)\frac{1}{T^7} + \frac{1}{40320}\Bigg(\frac{1107765}{64} - \frac{365655}{16}\alpha \\
&+ \frac{1367025}{16}\alpha^2 - \frac{855195}{32}\alpha^3 + \frac{50955975}{512}\alpha^4 - \frac{87315}{32}\alpha^5 + \frac{6214995}{128}\alpha^6 \\
&+ \frac{1107765}{64}\alpha^8\Bigg)\frac{1}{T^8} - \frac{1}{362880}\Bigg(-\frac{9904425}{128} + \frac{64605465}{256}\alpha - \frac{42655275}{128}\alpha^2 \\
&+ \frac{41754195}{64}\alpha^3 - \frac{140157945}{512}\alpha^4 + \frac{219921345}{512}\alpha^5 - \frac{17261145}{256}\alpha^6 + \frac{1376055}{256}\alpha^7 \\
&- \frac{9904425}{128}\alpha^9\Bigg)\frac{1}{T^9} + \frac{1}{3628800}\Bigg(\frac{573899565}{1024} - \frac{83526675}{64}\alpha + \frac{7990026375}{2048}\alpha^2 \\
&- \frac{734953875}{256}\alpha^3 + \frac{6398548575}{1024}\alpha^4 - \frac{85661025}{64}\alpha^5 + \frac{7934270475}{2048}\alpha^6 \\
&- \frac{3797325}{256}\alpha^7 + \frac{1473840825}{1024}\alpha^8 + \frac{573899565}{1024}\alpha^{10}\Bigg)\frac{1}{T^{10}} \qquad \text{(D.2)}
\end{aligned}
$$

Aus diesen Rohdaten lassen sich $c(T)$ und $s(T)$ gemäß der Gleichungen 4.1 und 4.2 berechnen.

E Differentialgleichungen für effektives Spinmodell

Aus Gleichung 7.41 ergeben sich folgende Differentialgleichungen für die Koeffizienten in Gleichung 7.40

$$\begin{aligned}
\frac{da(l)}{dl} &= \left(\omega^2 + \left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)(2J_2(l) - 2J_1(l)) + \left(\frac{1}{2}J_1(l) - \frac{1}{2}J_2(l)\right)\cdot\right. \\
&\quad \left.\cdot\left(J_1(l) - J_2(l)\right) + J_2(l)^2\right)a(l) + 2\omega\left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)b1(l) \\
&\quad + 2\omega\left(\frac{1}{2}J_1(l) - \frac{1}{2}J_2(l)\right)b2(l) + \omega J_2(l)b3(l) + \omega J_2(l)b4(l) \qquad \text{(E.1)} \\
\frac{db_1(l)}{dl} &= 2\left(2J_2(l) - 2J_1(l)\right)\omega a(l) + \left(\left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)\left(2J_2(l)\right.\right. \\
&\quad \left.\left. - 2J_1(l)\right) + \omega^2\right)b1(l) + \left(2J_2(l) - 2J_1(l)\right)\left(\frac{1}{2}J_1(l) - \frac{1}{2}J_2(l)\right)b_2(l) \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(2J_2(l) - 2J_1(l)\right)J_2(l)b_3(l) + \frac{1}{2}\left(2J_2(l) - 2J_1(l)\right)J_2(l)b_4(l) \qquad \text{(E.2)} \\
\frac{db_2(l)}{dl} &= 2\left(J_1(l) - J_2(l)\right)\omega a(l) + \left(J_1(l) - J_2(l)\right)\left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)b_1(l) \\
&\quad + \left(\left(\frac{1}{2}J_1(l) - \frac{1}{2}J_2(l)\right)\left(J_1(l) - J_2(l)\right) + \omega^2\right)b_2(l) + \frac{1}{2}\left(J_1(l)\right. \\
&\quad \left. - J_2(l)\right)J_2(l)b_3(l) + \frac{1}{2}\left(J_1(l) - J_2(l)\right)J_2(l)b_4(l) \qquad \text{(E.3)} \\
\frac{db_3(l)}{dl} &= 2\omega J_2(l)a(l) + J_2(l)\left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)b_1(l) + J_2(l)\left(\frac{1}{2}J_1(l)\right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2}J_2(l)\right)b_2(l) + \left(\frac{1}{2}J_2(l)^2 + \omega^2\right)b_3(l) + \frac{1}{2}J_2(l)^2 b_4(l) \qquad \text{(E.4)} \\
\frac{db_4(l)}{dl} &= 2\omega J_2(l)a(l) + J_2(l)\left(\frac{1}{2}J_2(l) - \frac{1}{2}J_1(l)\right)b_1(l) + J_2(l)\left(\frac{1}{2}J_1(l)\right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2}J_2(l)\right)b_2(l) + \frac{1}{2}J_2(l)^2 b_3(l) + \left(\frac{1}{2}J_2(l)^2 + \omega^2\right)b_4(l) \qquad \text{(E.5)}
\end{aligned}$$

Aus Gleichung 7.47 ergeben sich die Differentialgleichungen für $J_1(l)$ und $J_2(l)$ zu

$$\begin{aligned}
\frac{dJ_1(l)}{dl} = &\left(\frac{1}{2}b_4(l)^2 + \frac{1}{2}b_3(l)^2 - b_2(l)b_3(l) + \frac{1}{2}b_1(l)^2 + 2a(l)^2 + b_1(l)b_4(l)\right.\\
&\left.+ \frac{1}{2}b_2(l)^2\right)\omega - 2b_2(l)J_2(l)a(l) - a(l)J_1(l)b_4(l) - 2b_1(l)J_1(l)a(l)\\
&+ 2J_2(l)b_3(l)a(l) + \frac{5}{2}J_2(l)b_4(l)a(l) + \frac{5}{2}b_1(l)J_2(l)a(l)\\
&- \frac{1}{2}a(l)J_1(l)b_3(l) + \frac{3}{2}b_2(l)J_1(l)a(l)\\
&+ \coth\left(\frac{1}{2}\frac{\omega}{T}\right)\left((2a(l)b_2(l) - 2a(l)b_1(l))\,\omega + 3a(l)^2J_1(l) + \frac{1}{2}b_2(l)^2J_1(l)\right.\\
&- \frac{1}{2}b_2(l)^2J_2(l) + \frac{1}{2}b_1(l)^2J_1(l) - \frac{1}{2}b_1(l)^2J_2(l) + b_1(l)J_2(l)b_2(l)\\
&- 3J_2(l)a(l)^2 - \frac{1}{2}J_2(l)b_3(l)b_1(l) - \frac{1}{2}J_2(l)b_4(l)b_1(l) - b_1(l)J_1(l)b_2(l)\\
&\left.+ \frac{1}{2}J_2(l)b_3(l)b_2(l) + \frac{1}{2}J_2(l)b_4(l)b_2(l)\right) \qquad \text{(E.6)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dJ_2(l)}{dl} = &\left(\frac{1}{2}b_4(l)^2 + \frac{1}{4}b_2(l)^2 + \frac{1}{4}b_1(l)^2 + \frac{1}{2}b_3(l)^2 + a(l)^2\right)\omega\\
&+ b_1(l)J_2(l)a(l) + J_2(l)b_3(l)a(l) - b_1(l)J_1(l)a(l) + J_2(l)b_4(l)a(l)\\
&+ \frac{3}{4}b_2(l)J_1(l)a(l) - \frac{3}{4}b_2(l)J_2(l)a(l)\\
&+ \coth\left(\frac{1}{2}\frac{\omega}{T}\right)\left((2a(l)b_4(l) - 2a(l)b_2(l) + 2a(l)b_3(l) + 2a(l)b_1(l))\,\omega\right.\\
&- \frac{1}{2}b_1(l)^2J_1(l) + \frac{1}{2}J_2(l)b_4(l)^2 + J_2(l)b_3(l)b_1(l) - b_1(l)J_2(l)b_2(l)\\
&+ \frac{1}{2}b_2(l)J_1(l)b_4(l) + \frac{1}{2}J_2(l)b_3(l)^2 + 5J_2(l)a(l)^2 + \frac{1}{2}b_2(l)^2J_2(l)\\
&- \frac{1}{2}b_2(l)^2J_1(l) + \frac{1}{2}b_1(l)^2J_2(l) - 3a(l)^2J_1(l) + \frac{1}{2}b_2(l)J_1(l)b_3(l)\\
&+ J_2(l)b_3(l)b_4(l) - \frac{1}{2}b_1(l)J_1(l)b_4(l) - \frac{1}{2}b_1(l)J_1(l)b_3(l) - J_2(l)b_4(l)b_2(l)\\
&\left.+ b_1(l)J_1(l)b_2(l) + J_2(l)b_4(l)b_1(l) - J_2(l)b_3(l)b_2(l)\right) \qquad \text{(E.7)}
\end{aligned}$$

Es handelt sich um ein Differentialgleichungssystem mit sieben gekoppelten Gleichungen.

Literatur

[1] M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).

[2] M. Isobe and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1178 (1996).

[3] E. Dagotto and T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996).

[4] R. Cowley, D. Tennant, S. Nagler, and T. Perring, J. Mag. Mag. Mat. **140**, 1651 (1995).

[5] A. W. Garrett, S. E. Nagler, D. A. Tennant, B. C. Sales, and T. Barnes, Phys. Rev. Lett. **79**, 745 (1997).

[6] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).

[7] A. Klümper, Z. Phys. B **91**, 507 (1993).

[8] C. K. Majumdar, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 911 (1969).

[9] P. M. van den Broek, Phys. Lett. **77A**, 261 (1980).

[10] B. S. Shastry and B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981).

[11] W. J. Caspers and W. Magnus, Phys. Lett. **88A**, 103 (1982).

[12] S. Eggert, Phys. Rev. B **54**, R9612 (1996).

[13] L. Pitaevskii and S. Stringari, J. Low Temp. Phys. **85**, 377 (1991).

[14] G. S. Rushbrooke, G. A. Baker,Jr., and P. J. Wood, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1974), Vol. 3, Chap. 5, pp. 245–356.

[15] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh, and D. A. Huse, J. Stat. Phys. **59**, 1093 (1990).

[16] J. Riera and A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995).

[17] K. Fabricius, A. Klümper, U. Löw, B. Büchner, T. Lorenz, G. Dhalenne, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **57**, 1102 (1998).

[18] J. des Cloizeaux and J. J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962).

[19] A. Fledderjohann and C. Gros, Europhys. Lett. **37**, 189 (1997).

[20] M. Karbach and G. Müller, Comp. in Phys. **2**, (1997).

[21] J. Suzuki, Y. Akutsu, and M. Wadati, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 2667 (1990).

[22] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

[23] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).

[24] R. J. Bursill, T. Xiang, and G. A. Gehring, J. Phys.: Condens. Matter **8**, L583 (1996).

[25] X. Q. Wang and T. Xiang, Phys. Rev. B **56**, 5061 (1998).

[26] N. Shibata, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 2221 (1997).

[27] A. Klümper, R. Raupach, and F. Schönfeld, Phys. Rev. B **59**, 3612 (1999).

[28] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and D. Würtz, Phys. Rev. B **50**, 13515 (1994).

[29] G. S. Uhrig and B. Normand, Phys. Rev. B **58**, R14705 (1998).

[30] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1965).

[31] F. J. Wegner, Ann. Physik **3**, 77 (1994).

[32] M. C. Cross and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979).

[33] M. Braden, G. Wilkendorf, J. Lorenzana, M. Aïn, G. J. McIntyre, M. Behruzi, G. Heger, G. Dhalenne, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **54**, 1105 (1996).

[34] M. Braden, B. Hennion, W. Reichardt, G. Dhalenne, and A. Revcolevschi, Phys. Rev. Lett. **80**, 3634 (1998).

[35] R. Werner, C. Gros, and M. Braden, cond-mat/9810038 (1999).

[36] G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **57**, R14004 (1998).

[37] A. Mielke, Eur. Phys. J. B **5**, 605 (1998).

[38] M. Nishi, O. Fujita, and J. Akimitsu, Phys. Rev. B **50**, 6508 (1994).

[39] L. G. Caron and S. Moukouri, Phys. Rev. Lett. **76**, 4050 (1996).

[40] E. Pytte, Phys. Rev. B **10**, 2039 (1974).

[41] R. J. Bursill, R. H. McKenzie, and C. J. Hamer, cond-mat/9812409 (1998).

[42] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, and B. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd ed. (Cambridge University Press, New York, 1992).

[43] A. Guttmann, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1989), Vol. 13.

[44] N. Elstner, Persönliche Mitteilung .