

Verbesserte perturbative kontinuierliche unitäre Transformation mit direkter Auswertung

Erläutert anhand der Spin $S=1/2$ antiferromagnetischen
Heisenberg-Leiter

Diplomarbeit
zur Erlangung des akademischen Grades
Dipl. Phys.

vorgelegt von
Holger Krull
geboren in Dortmund

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Fakultät Physik
Otto-Hahn-Str. 4
D-44227 Dortmund
Technische Universität Dortmund
2011

1. Gutachter : Prof. Dr. Götz S. Uhrig
2. Gutachter : Prof. Dr. Frithjof Anders

Datum des Einreichens der Arbeit: 29. August 2011

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Aufbau der Arbeit	6
2	CUT-Methode	8
2.1	Flussgleichung	8
2.2	Generator	9
2.2.1	Generator nach Wegner	9
2.2.2	MKU-Generator	10
2.2.3	MKU-Varianten	12
2.3	Trunkierung	13
2.4	CUT-Varianten	14
2.4.1	Perturbative kontinuierliche unitäre Transformation	14
2.4.2	Selbstähnliche kontinuierliche unitäre Transformation	15
2.5	Residual-off-diagonality	18
3	Modelle	20
3.1	Spinleiter	20
3.2	Alternierende Spinleiter	24
4	Verbesserte perturbative CUT	27
4.1	Aufstellen des Differentialgleichungssystems	29
4.2	Perturbative Auswertung	37
4.3	Optimierung	41
4.3.1	$O_{\max}$ -Iteration	50
4.3.2	Auswahlregeln	51
4.3.2.1	A-posteriori Regeln	51
4.3.2.2	A-priori Regeln	55
4.4	Direkte Auswertung	59
5	Ergebnisse	61
5.1	Spinleiter	61
5.1.1	Grundzustand	61
5.1.2	Dispersion	68
5.1.3	DIMPY	80
5.2	Alternierende Spinleiter	83
5.2.1	Grundzustand	83
5.2.2	Dispersion	86
6	Zusammenfassung	93
6.1	Fazit	93

6.2	Ausblick	94
7	Anhang	95
7.1	Extrapolationen	95
7.1.1	Padé-Extrapolation	95
7.1.2	dlogPadé-Extrapolation	96
7.2	Koeffizienten	97
7.2.1	Koeffizienten: Dispersion der Spinleiter	97
7.2.2	Koeffizienten: Grundzustand der alternierende Spinleiter	98
7.2.3	Koeffizienten: Dispersion der alternierende Spinleiter .	98
	Abbildungsverzeichnis	102
	Tabellenverzeichnis	107
	Literaturverzeichnis	108
	Danksagung	113
	Erklärung	114

1 Einleitung

Die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung in dotierten Antiferromagneten hat ein reges Interesse an der Physik niedrigdimensionaler Quantenspinsysteme geweckt [1]. Denn die BCS-Theorie [2], welche die Supraleitung mit der durch Phononen erzeugte attraktiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung beschreibt, ist nicht im Stande dieses Phänomen zu erklären. Es wird aber vermutet, dass die Wechselwirkungen magnetischer Anregungen für die attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung verantwortlich sind. Deswegen ist es von Interesse, die magnetischen Eigenschaften der Materialien, die hochtemperatursupraleitend sind, zu beschreiben. Im undotierten Fall lassen sich diese Materialien mit Hilfe von Spin $S=1/2$ Heisenberg Modellen beschreiben. Mit diesem Modell kann man die magnetischen Eigenschaften beschreiben, weshalb Heisenberg Modelle Gegenstand der aktuellen Forschung sind. Die oben erwähnten Materialien sind zum Beispiel Cuprate. In Cupraten kommen Leiterstrukturen vor, welche gut mit dem Modell der Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter beschrieben werden können. Ziel der theoretischen Physik ist es ein solches Modell, wie die Spinleiter, qualitativ und quantitativ zu beschreiben. Dazu muss der Hamiltonoperator des Modells gelöst werden.

Ein wichtiges Werkzeug dabei ist die unitäre Transformation. Mit Hilfe der unitären Transformation lässt sich ein gegebener Hamiltonoperator in eine Basis transformieren, in der dieser leichter zu beschreiben ist. Die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind invariant unter dieser Transformation. Der Hamiltonoperator in der neuen Basis wird effektiver Hamiltonoperator genannt und sollte im Idealfall diagonal sein. Mit diesem effektiven Hamiltonoperator lassen sich die Eigenschaften, wie die Grundzustandsenergie oder die Dispersion, des effektiven Modells leichter beschreiben, als die des Modells in der alten Basis.

Eine Methode, welche unitären Transformationen nutzt, ist die kontinuierliche unitäre Transformation (continuous unitary transformation, CUT). Diese wurde unabhängig von Wegner [3], sowie Glazek und Wilson [4, 5] vorgeschlagen. In dieser Methode wird anstatt einer diskreten unitären Transformation, welche aufgrund der Komplexität der meisten Probleme häufig sehr schwer

zu bestimmen ist, eine kontinuierliche Transformationen verwendet. Damit erreicht man kontinuierlich den effektiven Hamiltonoperator. Der Fluss des Hamiltonoperator, während der Transformation, wird durch die Flussgleichung

$$\partial_l H(l) = [\eta(l), H(l)] \quad (1.0.1)$$

beschrieben. Dabei steht $\eta(l)$ für den Generator, dessen Wahl die Transformation bestimmt. Mit der geeigneten Generatorwahl und der Flussgleichung lässt sich der effektive Hamiltonoperator bestimmen.

Auf Basis dieser Idee haben sich mehrere CUT-Methoden entwickelt. Ein Ausblick über die Möglichkeiten der CUT gibt das Buch von Kehrein [6] und Referenz [7].

Eine Methode ist die sogenannte perturbative CUT (P-CUT) [8]. Die P-CUT erlaubt eine Realisierung der Mehrteilchen-Störreihen-Entwicklung. Jedoch ist die Anwendbarkeit der P-CUT an Voraussetzungen gebunden. Zum Beispiel muss bei der P-CUT der ungestörte Teil des Hamiltonoperators ein äquidistantes Energiespektrum besitzen [8]. Dies ist eine starke Einschränkung. Eine andere Methode ist die selbstähnliche (self-similar) CUT (S-CUT) [9]. Sie ist eine nicht perturbative Methode.

In dieser Arbeit wird auf Basis der S-CUT eine neue CUT-Methode entwickelt. Ziel dieser Methode ist eine perturbative Auswertung einer CUT, die nicht den Einschränkungen der P-CUT unterliegt. Damit verbessert diese Methode die bisherige P-CUT und wird deshalb verbesserte (enhanced) perturbative CUT (EP-CUT) genannt. Zusätzlich besitzt die EP-CUT eine nicht perturbative Auswertung, die direkte Auswertung.

Ziel dieser Arbeit ist es, die EP-CUT vorzustellen und deren Funktionsweise zu erläutern. Desweiteren soll die Funktionalität, insbesondere für den Fall eines nicht äquidistanten Energiespektrum, für die perturbative und direkte Auswertung gezeigt werden.

1.1 Aufbau der Arbeit

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut:

- In Kapitel 2 werden allgemein die Ideen der CUT erläutert. Es wird die Flussgleichung hergeleitet, welche die Grundlage aller kontinuierlicher unitärer Transformationen ist. Desweiteren werden die in dieser Arbeit verwendeten Generatoren vorgestellt. Da die neue Methode auf Ideen der S-CUT beruht und die P-CUT verbessert, werden beide Methode vorgestellt.
- In Kapitel 3 werden die Modelle vorgestellt, an welchen die neue Methode getestet wird. Diese sind die antiferromagnetische Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter und eine Erweiterung dieser. Die Spinleiter wurde als Testmodell gewählt, da sie ein schon häufig untersuchtes Modell ist, siehe Referenzen [1, 10, 11] und Referenzen darin. Die Erweiterung ist so gewählt, dass sie kein äquidistantes Energiespektrum im diagonalen Teil des Hamiltonoperators besitzt.
- In Kapitel 4 wird die EP-CUT vorgestellt. Es wird beschrieben wie man von der Flussgleichung auf den effektiven Hamiltonoperator schließt. Dazu wird das Aufstellen des Differentialgleichungssystems für den Hamiltonoperator hergeleitet und die möglichen Auswertungsarten, direkt und perturbativ, werden erörtert. Weiterhin werden in diesen Kapitel Optimierungen vorgestellt, die diese Methode in der praktischen Umsetzung effizienter machen.
- In Kapitel 5 wird die Funktionalität der EP-CUT anhand der Resultate für die Modelle aus Kapitel 3 gezeigt. Dazu werden die Grundzustandsenergie und die Dispersion beider Spinleitermodelle bestimmt. Dabei dient die normale Spinleiter als Referenzmodell, an dem die Funktionalität der EP-CUT gezeigt wird. Die Erweiterung der Spinleiter soll die Verbesserung der EP-Methode zeigen, da die Erweiterung ein nichtäquidistanten Energiespektrum besitzt, was bisher nicht perturbativ mit CUTs behandelt werden konnte.

2 CUT-Methode

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der CUT-Methode erläutert. Ziel der CUT-Methode ist es, aus einem gegebenen Hamiltonoperator H einen effektiven Operator H_{eff} abzuleiten, dessen Gestalt einfacher ist. Im Idealfall besitzt dieser dann Diagonalgestalt. Diese Methode wurde als erstes von Wegner [3] und unabhängig davon von Glazek und Wilson [4, 5] vorgeschlagen.

2.1 Flussgleichung

Mit Hilfe einer unitären Transformation U lässt sich aus einem Hamiltonoperator ein effektiver Operator wie folgt bestimmen

$$H_{\text{eff}} := U H U^\dagger. \quad (2.1.1)$$

Eine unitäre Transformation entspricht dabei einem Basiswechsel. Die Eigenwerte von H bleiben bei dieser Transformation erhalten.

In der CUT-Methode wird nun anstatt einer diskreten unitären Transformation eine kontinuierliche Transformation $U(l)$ eingeführt, die von einem Flussparameter l abhängt. Hieraus folgt

$$H(l) = U(l) H(0) U^\dagger(l) \quad (2.1.2)$$

mit $U(0) = 1$ und $H(0) = H$. Diese Transformation bringt den Hamiltonoperator kontinuierlich näher an die gewünschte Gestalt.

Differenziert man Gleichung 2.1.2 nach dem Flussparameter, so erhält man

$$\partial_l H(l) = \frac{dU(l)}{dl} H(0) U^\dagger(l) + U(l) H(0) \frac{dU^\dagger(l)}{dl} \quad (2.1.3)$$

$$= \frac{dU(l)}{dl} \underbrace{U^\dagger(l) U(l)}_{=1} H(0) U^\dagger(l) + U(l) H(0) \underbrace{U^\dagger(l) U(l)}_{=1} \frac{dU^\dagger(l)}{dl} \quad (2.1.4)$$

$$= \frac{dU(l)}{dl} U^\dagger(l) H(l) + H(l) U(l) \frac{dU^\dagger(l)}{dl}, \quad (2.1.5)$$

wobei der Ausdruck $\eta(l) := \frac{dU(l)}{dl}U^\dagger(l)$ als Generator definiert wird. Wie man leicht zeigen kann, ist der Generator antihermitesch

$$0 = \partial_l \mathbb{1} = \partial_l(U(l)U^\dagger(l)) = \frac{dU(l)}{dl}U^\dagger(l) + U(l)\frac{dU^\dagger(l)}{dl} \quad (2.1.6)$$

$$\Rightarrow \eta(l) = -\eta^\dagger(l). \quad (2.1.7)$$

Aus diesen Überlegungen erhält man die sogenannte Flussgleichung

$$\partial_l H(l) = [\eta(l), H(l)]. \quad (2.1.8)$$

Diese ist eine nichtlineare Differentialgleichung erster Ordnung, mit der sich der Fluss des Hamiltonoperators berechnen lässt. Wird die Flussgleichung bis $l = \infty$ integriert, so erhält man den effektiven Operator

$$H(l = \infty) = H_{\text{eff}}. \quad (2.1.9)$$

Auch Observablen $O(l)$ lassen sich mit der Flussgleichung

$$\partial_l O(l) = [\eta(l), O(l)] \quad (2.1.10)$$

transformieren. Bei dieser Transformation wird der Generator $\eta(l)$ aus der Transformation von H verwendet.

2.2 Generator

Das Problem, eine unitäre Transformation zu finden, wird in der CUT-Methode in das Problem, einen geeigneten Generator zu finden, umformuliert. Die Wahl des Generators bestimmt die Transformation und die Form von $H(l)$. Mögliche Generatoren werden in diesem Abschnitt vorgestellt.

2.2.1 Generator nach Wegner

Der Generator, der in der Arbeit von Wegner [3] definiert wurde, wird als η_{Weg} bezeichnet. Um diesen zu bestimmen, wird der Hamiltonoperator in einen diagonalen Anteil H_d und einen nichtdiagonalen Anteil H_{nd} aufgeteilt.

Damit lässt sich der Hamiltonoperator als

$$H = H_d + H_{nd} \quad (2.2.1)$$

schreiben. Der Generator ist definiert als

$$\eta_{\text{Weg}}(l) = [H(l), H_{nd}(l)] . \quad (2.2.2)$$

Besitzt der Hamiltonoperator keine Nichtdiagonalelemente, so verschwindet dieser Ausdruck. Ein allgemeiner Beweis der Konvergenz dieses Generators ist für endliche Matrizen in Referenz [3] und für unendliche Matrizen in Referenz [9] zu finden.

Jedoch bleibt bei diesem Generator eine Banddiagonalität des Anfangshamiltonoperator nicht erhalten. Es kann also die Komplexität des Problems während des Flusses wesentlich erhöht werden.

2.2.2 MKU-Generator

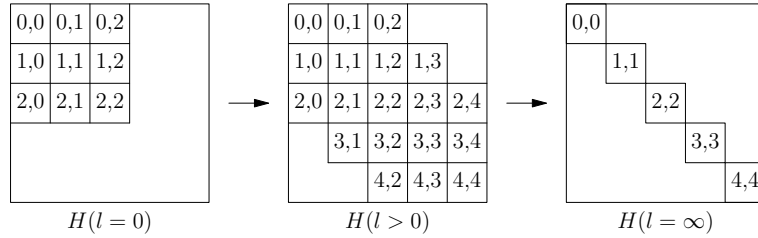


Abbildung 2.2.1: Schematische Darstellung des Hamiltonoperators während des Flusses für den MKU-Generator. Der Generator erhält die Banddiagonalität des Starthamiltonoperators. Er führt auf einen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator.

Ein weiterer Generator ist der MKU-Generator. Dieser wurde unabhängig von Mielke [12] für Bandmatrizen und Knetter, Uhrig [8] für Vielteilchensysteme entwickelt. Der Generator kann in zweiter Quantisierung formuliert werden. Das bedeutet, dass der Hamiltonoperator in einem Quasiteilchenbild beschrieben wird.

Der Hamiltonoperator lässt sich in dieser Formulierung als

$$H = H^+(l) + H^-(l) + H^0(l) \quad (2.2.3)$$

schreiben. Dabei sind $H^0(l)$ die teilchenzahlerhaltenden, $H^+(l)$ die teilchenzahlerhöhenden und $H^-(l)$ die teilchenzahlerniedrigenden Anteile des Hamiltonoperators.

Der Generator ist dann definiert als

$$\eta_{\text{MKU}} = H^+(l) - H^-(l). \quad (2.2.4)$$

Es stehen nur Terme im Generator, welche die Teilchenzahl nicht erhalten. Teilchenzahlerniedrigende Terme erhalten ein Minuszeichen.

Dieser Generator führt zu einem blockdiagonalen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator der Form

$$H_{\text{eff}} = H^0(\infty). \quad (2.2.5)$$

Die Form von H während des Flusses ist schematisch in Abbildung 2.2.1 dargestellt. Jeder Block beinhaltet nur Wechselwirkungen einer bestimmten Anzahl an Teilchen. Diese Eigenschaft erlaubt es, die einzelnen Unterräume mit unterschiedlichen Teilchenzahlen einzeln zu untersuchen. Zusätzlich sind diese Blöcke nach Energien geordnet. Damit entspricht der (0,0)-Block dem physikalischen Grundzustand, sofern dieser nicht entartet ist. Der (1,1)-Block den niedrigsten elementarer Anregungen. Der (2,2)-Block entspricht dem Zweiteilchenraum, welcher die Wechselwirkung zweier elementarer Anregungen beschreibt.

Desweiteren erhält dieser Generator die Blockbanddiagonalität [12] und erhält die Quasiteilchenzahl. Auch die Konvergenz des Generators ist bereits bewiesen worden, sofern ein Zustand minimaler Energie vorliegt [8, 12].

In dieser Arbeit wird nur der MKU-Generator und dessen im folgenden Abschnitt vorgestellten Varianten verwendet. Alle weiteren Erläuterungen bauen auf diesem Generator auf.

2.2.3 MKU-Varianten

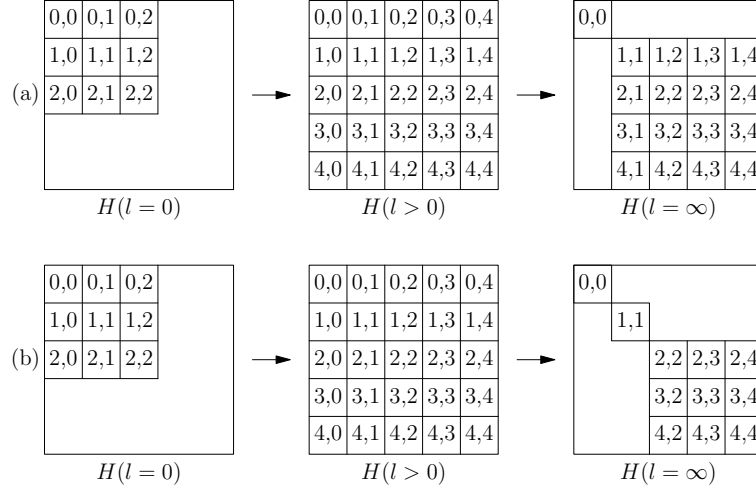


Abbildung 2.2.2: Schematische Darstellung des 0n-Generators (a) und des 0n:1n-Generators (b). Beide Generatoren erhalten nicht die Blockbanddiagonalität. Der 0n-Generator entkoppelt den (0,0)-Block, der 0n:1n-Generator zusätzlich noch den (1,1)-Block.

Es ist auch möglich, nur tiefliegende Teilchenräume zu entkoppeln. Dazu werden Varianten des MKU-Generators [13] verwendet. Diese Varianten haben den Vorteil, dass sie den numerischen Aufwand verkleinern und die Stabilität der Rechnungen verbessern. Jedoch erhalten sie nicht die Blockbanddiagonalität während des Flusses, wie man an Abbildung 2.2.2 erkennt. In dieser Abbildung sind der Fluss für die in dieser Arbeit verwendeten Varianten schematisch dargestellt. Diese werden im Folgenden vorgestellt.

Um den Vakuumzustand von den höheren Teilchenräumen zu entkoppeln, wird der 0n-Generator (Abb. 2.2.2 (a)) verwendet. Er lässt sich schreiben als

$$\eta_{0n} = H_0^+(l) - H_0^-(l). \quad (2.2.6)$$

Dabei stehen in $H_0^\pm(l)$ alle Wechselwirkungsterme, welche Quasiteilchen aus dem Vakuum erzeugen bzw. in das Vakuum vernichten.

Möchte man den 0-Teilchenraum und den 1-Teilchenraum entkoppeln, so wird der 0n:1n-Generator (Abb. 2.2.2 (b)) verwendet. Dieser lässt sich schrei-

ben als

$$\eta_{1n} = H_1^+(l) + H_0^+(l) - H_0^-(l) - H_1^-(l) \quad (2.2.7)$$

und beinhaltet alle Wechselwirkungen, die auf Nullteilchenzustände und Einteilchenzustände wirken. Desweiteren separiert er das Vakuum und den Einteilchenraum.

2.3 Trunkierung

Beim Berechnen des Kommutators in der Flussgleichung 2.1.8 werden typischerweise neue Terme in H erzeugt, welche nicht im Ursprungshamiltonoperator $H(0)$ vorhanden waren. Diese neuen Terme müssen in der Flussgleichung berücksichtigt werden, das heißt mit diesen Termen muss auch wieder der Kommutator berechnet werden. Dies kann natürlich wieder neue Terme erzeugen, mit denen man im gleichen Verfahren umzugehen hat.

Damit ergeben sich für unendliche Systeme typischerweise auch unendlich viele Terme. Aber auch für endliche Systeme erhält man eine exponentiell große Zahl an Termen. Damit man die Flussgleichung in praktischen Anwendungen aufstellen und integrieren kann, muss diese große Anzahl von Termen sinnvoll trunziert werden.

Trunkieren bedeutet, dass man einen Teil der neuerzeugten Terme bei der Berechnung nicht berücksichtigt. Diese Terme werden sozusagen abgeschnitten. Welche Terme behalten und welche trunziert werden, wird durch ein Trunkierungsschema bestimmt. Dieses wird vor der eigentlichen Berechnung festgelegt. Dabei gibt es viele Möglichkeiten.

Die in dieser Arbeit entwickelte EP-CUT-Methode trunziert nach einer festgelegten Ordnung eines Entwicklungsparameters, siehe Kapitel 4.1. Das bedeutet, dass alle Terme, die eine höhere Ordnung in diesem Entwicklungsparameter als die festgelegte haben, trunziert werden. Ein solches Trunkierungsschema nennen wir perturbative Trunkierung.

2.4 CUT-Varianten

In diesem Abschnitt werden die CUT-Varianten beschrieben, mit denen die EP-CUT verglichen wird. Es handelt sich dabei um die perturbative CUT (P-CUT) [8] und die selbstähnliche CUT (S-CUT) [9]. Diese Varianten werden hier für den MKU-Generator erläutert.

2.4.1 Perturbative kontinuierliche unitäre Transformation

Für die P-CUT benötigt man einen Hamiltonoperator, der sich in einen ungestörten Teil und einen gestörten Teil mit Störparameter x unterteilen lässt:

$$H = H_0 + xV . \quad (2.4.1)$$

Desweiteren müssen folgende Bedingungen erfüllt sein.

1. H_0 muss ein von unten beschränktes äquidistantes Energiespektrum besitzen.
2. V muss sich als $V = \sum T_n$ darstellen lassen, wobei N eine positive ganze Zahl ist, T_n ist ein Operator, der die Anzahl der Quasiteilchen um n erhöht bzw. n verringert (falls $n < 0$).

Sind diese Bedingungen erfüllt, zwingt man das Problem auf eine banddiagonale Gestalt [8]. Nun kann man für den Hamiltonoperator den Ansatz

$$H(x, l) = H_0 + \sum_{k=1}^{\infty} x^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(l, \underline{m}) T(\underline{m}) \quad (2.4.2)$$

machen. Dabei gibt k die Ordnung an. Der Vektor $\underline{m}$ ist ein Vektor der Dimension $|\underline{m}| = k$, bei denen die Komponenten Elemente von

$$\{\pm N, \pm(N-1), \dots, \pm 1, 0\}$$

sind. $T(\underline{m})$ steht für das Produkt von T_{m_i} Operatoren, also

$$T(\underline{m}) = T_{m_1} T_{m_2} \dots T_{m_i} .$$

Der Generator lässt sich in dieser Schreibweise zu

$$\eta(x, l) = \sum_{k=0}^{\infty} x^k \sum_{|\underline{m}|=k} \text{sign}(M(\underline{m})) F(l, \underline{m}) T(\underline{m}) \quad (2.4.3)$$

bestimmen. Dabei entspricht $M(\underline{m}) := \sum_i m_i$.

Um den effektiven Hamiltonoperator zu erhalten, müssen die Koeffizienten $F(l, \underline{m})$ bestimmt werden. Dazu setzt man die Ansätze für $H(x, l)$ und $\eta(x, l)$ in die Flussgleichung 2.1.8 ein. Durch einen Koeffizientenvergleich erhält man ein rekursives Differentialgleichungssystem für die $F(l, \underline{m})$, welches analytisch lösbar ist [8]. Damit erhält man

$$H_{\text{eff}} = H_0 + \sum_{k=1}^{\infty} x^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(\infty, \underline{m}) T(\underline{m}) \quad (2.4.4)$$

als effektiven Hamiltonoperator. Dieser Hamiltonoperator ist teilchenzahlerhaltend, da alle Koeffizienten mit $M(\underline{m}) \neq 0$ Null sind.

2.4.2 Selbstähnliche kontinuierliche unitäre Transformation

Bei der S-CUT ist der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung der Form

$$H(l) = \sum_i h_i(l) \hat{H}_i \quad (2.4.5)$$

dargestellt. Dabei wird das Produkt aus Koeffizient $h_i(l)$ und Monom von lokalen Operatoren als Term bezeichnet. Während des Fluss ändern sich nur die Koeffizienten der Terme, nicht aber die Operatoren. Die Operatoren dienen als feste Basis für $H(l)$, weshalb diese Methode selbstähnlich genannt wird.

Um den Fluss des Hamiltonoperators zu beschreiben, muss die Flussgleichung 2.1.8 für die Koeffizienten umgeschrieben werden.

Der Generator lässt sich analog als

$$\eta(l) = \sum_i h_i(l) \hat{\eta}_i \quad (2.4.6)$$

schreiben. Dabei wird nur über Terme summiert, die dem Generatorschema entsprechen.

Setzt man die Ausdrücke für Hamiltonoperator und Generator in die Flussgleichung (Gl. 2.1.8) ein, so erhält man

$$\partial_l \sum_i h(l)_i \hat{H}_i = \sum_{j,k} h_j(l) h_k(l) [\hat{\eta}_j, \hat{H}_k]. \quad (2.4.7)$$

In dieser Darstellung müssen nur die Operatoren kommutiert werden. Die Koeffizienten können aus dem Kommutator gezogen werden. Um ein Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten zu bestimmen, wird der Kommutator auf der rechten Seite berechnet und anschließend normalgeordnet, so dass alle Erzeugungsoperatoren links und alle Vernichtungsoperatoren rechts stehen. Damit erhält man

$$[\hat{\eta}_j, \hat{H}_k] = \sum_i M_{i,j,k} \hat{H}_i, \quad (2.4.8)$$

wobei die $M_{i,j,k}$ die Beiträge sind, die aus der Kommutatorberechnung folgen. Mit Hilfe eines Koeffizientenvergleichs lässt sich das gesuchte Differentialgleichungssystem bestimmen. Es besitzt die Form

$$\partial_l h_i(l) = \sum_{j,k} M_{i,j,k} h_j(l) h_k(l). \quad (2.4.9)$$

Diese Flussgleichung in zweiter Quantisierung wird auch in der EP-CUT verwendet, siehe Kapitel 4.1. Die Summanden auf der rechten Seite werden als Beiträge des Differentialgleichungssystems bezeichnet. Die $M_{i,j,k}$ definieren das Differentialgleichungssystem, dabei ist zu beachten, dass viele Einträge der $M_{i,j,k} = 0$ sind.

Wie schon in Kapitel 2.3 erwähnt muss bei unendlichen Systemen trunkiert werden, damit man ein geschlossenes System erhält. Bei der S-CUT bestimmt die Trunkierung die Gestalt des effektiven Hamiltonoperators während und nach dem Fluss. Eine mögliche Trunkierung in der S-CUT ist eine Trunkierung, die sich an der Anzahl der beteiligten Quasiteilchen und der Reichweite

der Wechselwirkung richtet. Dabei wird jeder Anzahl an Quasiteilchen eine maximale Reichweite zugeordnet. Besitzt ein Term, mit einer gewissen Anzahl an Quasiteilchen, eine größere Reichweite als die maximale Reichweite, so wird dieser Term trunziert. Die Notation dieser Art von Trunkierung wird in dieser Arbeit mittels $(d_2, d_3, \dots)$ angegeben. Dabei stehen die d_i für die Reichweite eines Terms bei denen i Quasiteilchen beteiligt sind. Da die Terme mit $i = 0$ oder $i = 1$ lokal sind, wird für diese keine Reichweite definiert, das heißt, diese Terme werden nie trunziert. Eine schematische Darstellung einer $(8,6,6,4,4,2,2)$ Trunkierung ist in Abbildung 2.4.1 zu sehen.

∞	∞	8	6	6
∞	8	6	6	4
8	6	6	4	4
6	6	4	4	2
6	4	4	2	2

Abbildung 2.4.1: Darstellung des $(8,6,6,4,4)$ -Trunkierungsschemas. Die kleinen Rechtecke entsprechen dabei den verschiedenen Blöcken des Hamiltonoperators. Zum Beispiel erhält ein Term aus dem $(1,1)$ -Block die Reichweite $d_2 = 8$. Der $(0,0)$ -Block ist lokal und wird nicht trunziert. Dies ist mit den ∞ -Symbol gekennzeichnet.

Ist das Trunkierungsschema festgelegt, so kann man den Kommutator berechnen. Dabei kann es sein, dass neue Terme erzeugt werden. Sie werden, sofern sie nicht trunziert werden, in den Hamiltonoperator eingefügt. Für deren Koeffizienten gilt dann

$$h_{\text{Neu}}(l = 0) = 0. \quad (2.4.10)$$

Auch für diese neuen Terme muss der Kommutator berechnet werden. Dabei können wieder neue Terme entstehen, mit denen man analog vorgeht. Dieses

wird so lange wiederholt, bis alle Terme durchkommutiert worden sind und keine neuartigen Terme mehr entstehen. Der Kommutator wird also selbstkonsistent gelöst.

Ist der komplette Kommutator berechnet worden, lässt sich das Differentialgleichungssystem, siehe Gleichung 2.4.9, nach bekanntem Vorgehen aufstellen. Um daraus den effektiven Hamiltonoperator zu bestimmen, wird das Differentialgleichungssystem integriert. Der effektive Hamiltonoperator ist durch

$$H_{\text{eff}} = \sum_i h(\infty)_i \hat{H}_i \quad (2.4.11)$$

bestimmt.

Da bei praktischen Anwendungen jedoch eine Integration, welche meistens numerisch erfolgt, bis $l = \infty$ nicht möglich ist, wird nur bis zu einem bestimmten l -Wert integriert. Dadurch sind Beiträge, die eigentlich eliminiert werden sollten, noch vorhanden. Ein Maß für die Größe dieser Elemente erhält man mit der residual off-diagonality (ROD), welche im Abschnitt 2.5 erläutert wird. Damit lässt sich die Konvergenz des Differentialgleichungssystems bestimmen.

2.5 Residual-off-diagonality

Bei der P-CUT sowie der perturbative Auswertung der EP-CUT, siehe Kapitel 4.2, konvergieren die Differentialgleichungssysteme immer. Bei der S-CUT sowie der direkten Auswertung der EP-CUT, siehe Kapitel 4.4, muss das nicht der Fall sein, da bei gewissen x -Werten die Teilchenräume überlappen können und deshalb das Differentialgleichungssystem anfangen kann zu divergieren. Um ein Maß für die Konvergenz des Differentialgleichungssystems zu erhalten, wird die residual-off-diagonality (ROD) berechnet. Diese berechnet sich aus der Summe der Nichdiagonalelemente zu

$$\text{ROD} = \sqrt{\sum_i |h_i|^2}. \quad (2.5.1)$$

Damit kann man angeben, wie sich die Nichtdiagonalität während des Flusses ändert. Für konvergierende Rechnungen sollte die ROD für hinreichend hohe l -Werte gegen Null gehen. Häufig finden wir für lückenbehaftete Systeme einen exponentiellen Abfall.

3 Modelle

Die im Kapitel 4 vorgestellte EP-CUT soll am Modell der Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter getestet werden. Dieses Modell wird in Kapitel 3.1 beschrieben. Es wird im weiteren Verlauf immer als Spinleiter bezeichnet. Da die Spinleiter ein sehr häufig untersuchtes Modell ist, siehe Referenzen [1, 10, 11] und Referenzen darin, eignet es sich gut, um die Funktionalität der EP-CUT-Methode zu zeigen. Um zu zeigen, dass die EP-CUT auch bei nicht äquidistanten Energiespektrum funktioniert, wird diese an einem Spinleitermodell mit alternierenden Sprossenkopplungen untersucht. Dieses Modell wird im Kapitel 3.2 vorgestellt und alternierende Spinleiter genannt.

3.1 Spinleiter

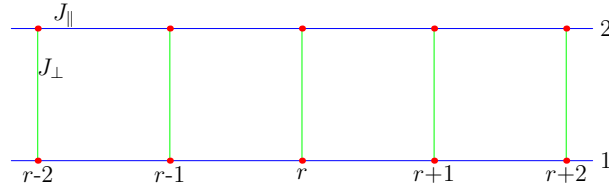


Abbildung 3.1.1: Schematische Darstellung der Spinleiter. Die roten Punkte stehen für die Spins mit $S=1/2$. Die grüne Linie steht für die Sprossen- und die blaue für die Holmkopplung.

Die Spin $S=1/2$ Heisenberg-Leiter, die in dieser Arbeit verwendet wird, wird durch den Hamiltonoperator

$$H = J_{\perp} H_{\perp} + J_{\parallel} H_{\parallel} \quad (3.1.1)$$

$$H_{\perp} = \sum_r \vec{S}_{1,r} \vec{S}_{2,r} \quad (3.1.2)$$

$$H_{\parallel} = \sum_r (\vec{S}_{1,r} \vec{S}_{1,r+1} + \vec{S}_{2,r} \vec{S}_{2,r+1}) \quad (3.1.3)$$

beschrieben. Dabei gibt r die Sprosse der Spinleiter an. Der jeweilige Holm der Spinleiter wird mit 1 und 2 angegeben. Die Kopplung $J_{\perp}$ ist die Sprossenkopplung und $J_{\parallel}$ die Holmkopplung. Da die Spinleiter antiferromagnetisch

sein soll, gilt $J_\perp, J_\parallel > 0$. Die Spinleiter ist in Abbildung 3.1.1 schematisch dargestellt. Als Entwicklungsparameter wird das Verhältnis von Holm- zu Sprossenkopplung verwendet. Dieses Verhältnis wird mit $x = J_\parallel/J_\perp$ bezeichnet.

Als Startpunkt für die neue CUT muss der Hamiltonoperator in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von Anregungen umgeschrieben werden. Diese Anregungen werden Triplonen [11, 14] genannt. Triplonen sind Tripletzustände inklusive ihrer magnetischen Polarisation der Umgebung. Um den Hamiltonoperator in die Triplonsprache umzuschreiben, wird die bond-operator-Darstellung [15] verwendet. Als Referenzzustand wird der Grundzustand der Spinleiter für den Fall $x = 0$ verwendet. Für $x = 0$ ist der Grundzustand durch den Produktzustand der Singulettzustände $|s\rangle_r$ auf jeder Sprosse gegeben. Man erhält also als Referenzzustand

$$|0\rangle := \prod_r |s\rangle_r = \prod_r \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (3.1.4)$$

Die Tripletzustände sind definiert als

$$t_{x,r}^\dagger |s\rangle_r := |t_x\rangle_r = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (3.1.5)$$

$$t_{y,r}^\dagger |s\rangle_r := |t_y\rangle_r = \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (3.1.6)$$

$$t_{z,r}^\dagger |s\rangle_r := |t_z\rangle_r = \frac{-1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (3.1.7)$$

mit den Erzeugern $t_{\alpha,r}^\dagger$. Vernichtungsoperatoren werden mit $t_{\alpha,r}$ bezeichnet. Triplonen sind hardcore-Bosonen, da maximal eines pro Sprosse erzeugt werden kann. Deshalb erfüllen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Hardcore-Boson-Kommutatorrelation

$$[t_{\alpha,r}, t_{\beta,s}^\dagger] = \delta_{r,s}(\delta_{\alpha,\beta} - t_{\beta,r}^\dagger t_{\alpha,r} - \delta_{\alpha,\beta} \sum_\gamma (t_{\gamma,r}^\dagger t_{\gamma,r})). \quad (3.1.8)$$

Die griechischen Indizes stehen für x, y oder z . In dieser Darstellung lässt sich der Hamiltonoperator schreiben als

$$\frac{H}{J_{\perp}} = H^{(0)} + H^{(1)}, \quad (3.1.9)$$

mit

$$H^{(0)} = -\frac{3}{4} \sum_r \mathbb{1} + \sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r} \quad (3.1.10)$$

$$\begin{aligned} H^{(1)} = & \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha} (t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1} + t_{\alpha,r+1}^{\dagger} t_{\alpha,r}) \\ & + \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\beta,r+1}^{\dagger} t_{\beta,r} t_{\alpha,r+1} \\ & - \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1}^{\dagger} t_{\beta,r} t_{\beta,r+1} \\ & + \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha} (t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1}^{\dagger} + t_{\alpha,r} t_{\alpha,r+1}). \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

Dabei steht $H^{(0)}$ bzw. $H^{(1)}$ für alle Terme die nullter bzw. erster Ordnung in x sind. Aufgrund der Translationssymmetrie lässt sich dieses Problem mit der EP-CUT auf einer unendlichen Spinleiter berechnen. Denn die Translationssymmetrie sorgt dafür, dass identische Prozesse, die nur in der Position auf der Spinleiter verschoben sind, die selben Koeffizienten haben. Deshalb muss nur ein Repräsentant dieser Symmetriegruppe behandelt werden und nicht alle Terme. Durch die Berechnung einer unendlichen Spinleiter erhält man den thermodynamischen Limes bei der Auswertung der Spinleiter.

Desweiteren besitzt der Hamiltonoperator folgende Symmetrien, welche in den Berechnungen verwendet werden. Es werden die Invarianz unter Permutation der Spinindizes, die Spiegelsymmetrie und die Selbstadjungiertheit verwendet. Diese Symmetrien sind sehr hilfreich beim Aufstellen und Lösen der Flussgleichung, siehe Kapitel 4.3. Man muss nämlich nur den Koeffizient eines Repräsentantenterms bestimmen und kennt damit diese für alle Terme dieser Symmetriegruppe [16]. Das reduziert den numerischen Aufwand in Speicher und Laufzeit erheblich.

Die Spinleiter ist ein häufig untersuchtes Modell über das viele Tatsachen bekannt sind, darum eignet es sich gut als Testmodell der neuen CUT-Methode. Es wurde schon häufig mit unterschiedlichen Methoden untersucht, zum Beispiel DMRG [17], exakte Diagonalisierung [18], Lanczos-Methode [19], Quanten-Monte-Carlo [20] sowie mit perturbativen Methoden [21, 22]. Unter anderem ist die Spinleiter auch mit den CUT-Varianten P-CUT [23] und S-CUT [24] untersucht worden.

Stimmen die Ergebnisse der EP-CUT mit den bekannten Resultaten überein, ist die Leistungsfähigkeit der EP-CUT gezeigt. Untersucht werden dazu die Grundzustandsenergie und die Dispersion $\omega(k, x)$ dieser Spinleiter. Dazu werden hier die Ergebnisse der vorgestellten Arbeiten diskutiert.

Die Grundzustandsenergie nimmt mit steigender x -Kopplung ab.

Die Einteilchendispersion ist für $x = 0$ konstant, da dann die Triplonen lokal sind. Für kleine x -Werte liegt das Maximum der Dispersionkurve bei $k = 0$. Mit größer werdenden x verschiebt sich dieses zu $k = \pi/2$. Desweiteren besitzt die Dispersion eine Energielücke Δ bei $k = \pi$. Für $x \rightarrow \infty$ geht diese gegen einen konstanten Wert von $\Delta/J_{\perp} = 0.41$ [20].

Neben dem theoretischen Interesse an dem Hamiltonoperator findet man auch viele Materialien, die man mit Hilfe dieses Modells beschreiben kann. Ein Überblick über diese Materialien liefert Referenz [10]. Es handelt sich zum Beispiel um die Materialien Vanadyl-Pyrophosphat $((\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7)$ und Cuprate wie SrCu_2O_3 . Ein weiteres Beispiel für ein solches Material ist das sogenannte DIMPY $((\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N})_2\text{CuBr}_4)$ [25, 26]. DIMPY ist eine beinahe perfekte Verwirklichung einer Spinleiter mit starker Holmenkopplung [25]. Eine starke Holmkopplung bedeutet, dass der Entwicklungsparameter deutlich über 1, in diesem Fall bei $x \approx 2$ [25], liegt. Damit ist eine perturbative Auswertung dieses Problems sehr anspruchsvoll. Jedoch besitzt die EP-CUT mit der direkten Auswertung, siehe Kapitel 4.4, eine Möglichkeit auch solche Probleme zu lösen, da die direkte Auswertung auch für große Entwicklungsparameter gute Ergebnisse liefert, siehe Kapitel 5. Dieser Vorteil der direkten Auswertung wird anhand der Dispersion von DIMPY gezeigt. Dazu wird die Dispersion und x -Kopplung mit Hilfe experimentieller Daten [25, 27] bestimmt, siehe Kapitel 5.1.3.

3.2 Alternierende Spinleiter

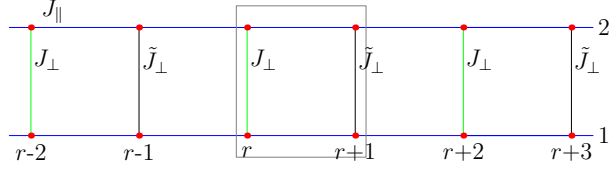


Abbildung 3.2.1: Schematische Darstellung der alternierenden Spinleiter. Die roten Punkte stehen für die Spins mit $S = 1/2$. Die grüne Linie steht für die Sprossen- und die blaue für die Holmenkopplung. Die Sprossenkopplung $\tilde{J}_\perp$ ist mit der schwarzen Linie gekennzeichnet. Die verwendete Elementarzelle ist durch das graue Rechteck gegeben.

Das Modell der alternierenden Spinleiter unterscheidet sich zu dem der Spinleiter darin, dass man in abwechselnder Reihenfolge unterschiedlich starke Sprossenkopplungen besitzt. Dargestellt ist die alternierende Spinleiter in Abbildung 3.2.1. Die zwei sich abwechselnden Sprossenkopplungen werden als $J_\perp$ und $\tilde{J}_\perp$ bezeichnet. Dabei soll ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\tilde{J}_\perp > J_\perp$ gelten. Der Hamiltonoperator lautet dann

$$H = J_\perp H_\perp + \tilde{J}_\perp H'_\perp + J_\parallel H_\parallel \quad (3.2.1)$$

$$H_\perp = \sum_{r=2n} \vec{S}_{1,r} \vec{S}_{2,r} \quad (3.2.2)$$

$$H'_\perp = \sum_{r=2n+1} \vec{S}_{1,r} \vec{S}_{2,r} \quad (3.2.3)$$

$$H_\parallel = \sum_r (\vec{S}_{1,r} \vec{S}_{1,r+1} + \vec{S}_{2,r} \vec{S}_{2,r+1}) . \quad (3.2.4)$$

Dabei ist $n \in \mathbb{Z}$. Durch die unterschiedlichen Sprossenkopplungen besitzt dieses Modell kein äquidistantes Energiespektrum im diagonalen Teil des Hamiltonoperators. Dieses Modell lässt sich also nicht mehr mit Hilfe der P-CUT bestimmen. Die neue CUT-Methode jedoch hat diese Einschränkung nicht und kann dieses Problem lösen. Da das Modell noch hinreichend einfach ist, eignet es sich sehr gut, um die Leistungsfähigkeit der Verbesserung zu zeigen.

Als Entwicklungsparameter der CUT wird wieder $x = J_{\parallel}/J_{\perp}$ verwendet. Das Verhältnis der Sprossenkopplungen zueinander soll als $J'_{\perp} = \tilde{J}_{\perp}/J_{\perp}$ bezeichnet werden. Nach Voraussetzung gilt immer $J'_{\perp} \geq 1$. Als Startpunkt für die CUT wird wieder die Triplondarstellung verwendet. Damit lässt sich der Hamiltonoperator zu

$$\frac{H}{J_{\perp}} = H^{(0)} + H^{(1)}, \quad (3.2.5)$$

mit

$$H^{(0)} = -\frac{3}{4} \sum_{r=2n} \mathbb{1} + \sum_{r=2n} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r} \quad (3.2.6)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{3}{4} J'_{\perp} \sum_{r=2n+1} \mathbb{1} + J'_{\perp} \sum_{r=2n+1} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r} \\ H^{(1)} = & \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha} (t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1} + t_{\alpha,r+1}^{\dagger} t_{\alpha,r}) \\ & + \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\beta,r+1}^{\dagger} t_{\beta,r} t_{\alpha,r+1} \\ & - \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1}^{\dagger} t_{\beta,r} t_{\beta,r+1} \\ & + \frac{x}{2} \sum_{r,\alpha} (t_{\alpha,r}^{\dagger} t_{\alpha,r+1}^{\dagger} + t_{\alpha,r} t_{\alpha,r+1}) \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

angeben. Dieser Hamiltonoperator besitzt dieselben Symmetrien wie die Spinleiter. Die Translationssymmetrie ist erhalten, da man eine größere Elementarzelle verwendet. Diese enthält zwei Sprossen mit unterschiedlicher Sprossenkopplung, wie in Abbildung 3.2.1 dargestellt.

Um die Funktionalität der EP-CUT für dieses Modell zu zeigen, soll im Folgenden die zu erwartenden Resultate für die Grundzustandsenergie und der Dispersion diskutiert werden.

Zunächst erhält man für $\tilde{J}_{\perp} = J_{\perp}$ wieder die Spinleiter aus Kapitel 3.1 und man kann die Konsistenz der Methode testen. Für die Grundzustandsenergie erwartet man mit ansteigender $J'_{\perp}$ -Kopplung eine Absenkung der Energie. Für die Dispersion erhält man durch die Wahl der Elementarzelle eine klei-

nere Brillouinzone und somit zwei Dispersionszweige¹. Für $\tilde{J}_\perp = J_\perp$ liegen die beiden Zweige an Rand der Brillouinzone ($k = \frac{\pi}{2}$) auf demselben Wert. Mit steigender $J'_\perp$ -Kopplung entsteht eine Energielücke zwischen den Zweigen bei $k = \frac{\pi}{2}$. Die Energielücke wächst mit steigender Kopplung.

¹Eine Herleitung der Dispersionsgleichung findet sich in Kapitel 5.2.2.

4 Verbesserte perturbative CUT

Dieses Kapitel befasst sich mit der EP-CUT-Methode. Diese Methode ermöglicht eine perturbative Auswertung der CUT, die nicht wie die P-CUT auf äquidistante ungestörte Spektren eingeschränkt ist. Vereinfacht kann man sich diese als S-CUT mit perturbativem Trunkierungsschema vorstellen.

Ziel der EP-CUT ist einen effektiven Hamiltonoperator bis zur einer bestimmten Ordnung eines Entwicklungsparameter x korrekt zu beschreiben. Die bestimmte Ordnung wird im weiteren Verlauf als Zielordnung O_{Ziel} bezeichnet.

Als Startpunkt für diese CUT wird ein Hamiltonoperator der Form

$$H = H_0 + xV \quad (4.0.8)$$

verwendet. Dieser Hamiltonoperator entspricht dem der P-CUT. Jedoch wird in diesem Fall H_0 nicht durch die Bedingung, ein äquidistanten Energiespektrum zu besitzen, eingeschränkt. Die einzige Bedingung, die an H_0 gestellt wird, ist, dass H_0 lokal und diagonal sein soll. Diese Bedingung ist nicht zwingend für die EP-CUT, allerdings funktioniert die EP-CUT so am besten. Deshalb wird im Folgenden diese Methode für den Fall, dass H_0 lokal und diagonal ist, beschrieben. Worauf bei den anderen Fällen, z. B. wenn H_0 nicht diagonal ist, zu achten ist, wird kurz in Kapitel 4.2 erläutert.

Die EP-CUT lässt sich in zwei Teile aufteilen ähnlich wie die S-CUT. Der erste ist das Aufstellen des Differentialgleichungssystems und der zweite das Lösen dieses Differentialgleichungssystems.

Zum Aufstellen des Differentialgleichungssystems (1. Teil) wird der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung formuliert

$$H(l) = \sum_i h_i^{(n_i)}(l) \hat{H}_i. \quad (4.0.9)$$

Das n_i gibt die Ordnung des jeweiligen Terms mit Index i an.

In dieser Darstellung lässt sich analog zur S-CUT die Flussgleichung in zweiter Quantisierung umformulieren, siehe Gleichungen 2.4.7 bis 2.4.9. Es muss

also auch der Kommutator der Operatoren der Terme berechnet werden, um auf das Differentialgleichungssystem der Koeffizienten zu schließen. Der Unterschied zur S-CUT liegt im Trunkierungsschema. Im Falle der EP-CUT wird kein selbstähnliches sondern ein perturbatives Trunkierungsschema gewählt. Dies bedeutet, dass bei der Kommutatorberechnung Terme des Hamiltonoperators und Beiträge des Differentialgleichungssystems trunkiert werden, die eine höhere Ordnung als die Zielordnung besitzen.

Mit diesem Trunkierungsschema erhält man eine Vorschrift für den Kommutator. Es müssen nur Kommutatoren $[\hat{\eta}_i, \hat{H}_j]$ berechnet werden, für die

$$n_i + n_j \leq O_{\text{Ziel}} \quad (4.0.10)$$

gilt. Damit erhält man ein Differentialgleichungssystem, das bis zur gewünschten Zielordnung den Fluss korrekt beschreibt, da alle Terme des Hamiltonoperators und Beiträge des Differentialgleichungssystems bis zur Zielordnung berücksichtigt werden.

Im Kapitel 4.1 wird der Algorithmus dieser Kommutatorberechnung für die EP-CUT beschrieben. Mit diesem erhält man ein Differentialgleichungssystem der Struktur

$$\partial_l h_i^{(n_i)}(l) = \sum_{j,k} M_{i,j,k} h_j^{(n_j)}(l) h_k^{(n_k)}(l), \quad (4.0.11)$$

wobei die $M_{i,j,k}$ wieder aus der Kommutatorberechnung folgen.

Im zweiten Teil der EP-CUT wird dieses aufgestellte Differentialgleichungssystem gelöst. Dieses Differentialgleichungssystem lässt sich zum einen perturbativ lösen. Diese Auswertung wird perturbative Auswertung genannt. Die Umsetzung dieser ist in Kapitel 4.2 erläutert.

Wichtig bei dieser Methode ist es, hohe Ordnungen zu erreichen. Mit hohen Ordnungen lassen sich große Reichweiten in der Wechselwirkung beschreiben, denn die berücksichtigte Reichweite des Systems ist durch die Ordnung gegeben. Dies liegt daran, dass H_0 räumlich lokal ist und V die Gitterplätze verbindet. Damit die EP-CUT in der praktischen Umsetzung hohe Ordnungen erreichen kann, kann man beide Teile dieser Methode noch optimieren.

Die Optimierungen werden in Kapitel 4.3 vorgestellt. Diese sorgen dafür, dass beim Aufstellen und Lösen des Differentialgleichungssystems Rechenzeit und Arbeitsspeicher minimiert werden.

Desweiteren liefert das Differentialgleichungssystem nach der Optimierung eine weitere Möglichkeit der Auswertung, die sogenannte direkte Auswertung. Sie ist eine nicht perturbative Auswertung und wird in Kapitel 4.4 erläutert.

4.1 Aufstellen des Differentialgleichungssystems

In diesem Kapitel wird erläutert, wie man das Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten möglichst effizient aufstellt.

Dazu wird zunächst der Hamiltonoperator aus Gleichung 4.0.9 folgendermaßen umgeschrieben

$$H(l) = H^{(0)}(l) + H^{(1)}(l) + \dots, \quad (4.1.1)$$

wobei im Block $H^{(n)}$ alle Terme stehen, die n-ter Ordnung im Entwicklungsparameter sind. Desweiteren soll $H^{(0)} = H_0$ lokal und diagonal sein. Den Generator kann man auch nach Ordnungen in x

$$\eta(l) = \eta^{(1)}(l) + \eta^{(2)}(l) + \dots \quad (4.1.2)$$

schreiben. Da $H^{(0)}$ diagonal ist, existiert kein Generatorterm in nullter Ordnung, was die Auswertung im Folgenden vereinfacht.

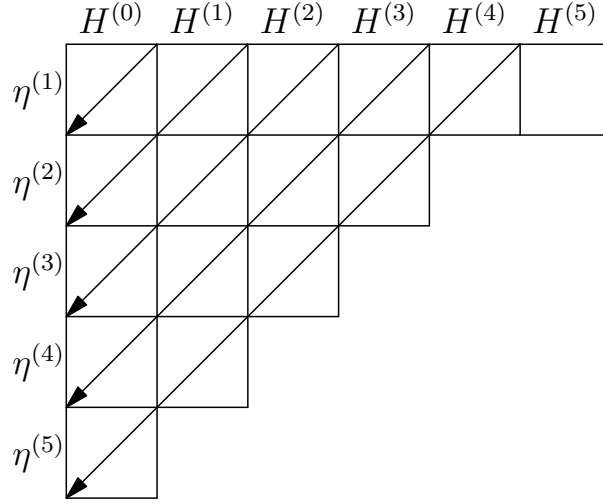


Abbildung 4.1.1: Schematische Darstellung der Berechnung der Kommutatoren. Beginnend mit dem Kommutator $[\eta^{(1)}, H^{(0)}]$, der die Beiträge 1. Ordnung bestimmt, werden alle Ordnungen von $\partial_l H(l)$ iterativ bestimmt. In dieser Abbildung wird die 1. bis zur 5. Ordnung berechnet.

Aufgrund des perturbativen Trunkierungsschemas müssen alle Kommutatoren $[\eta^{(i)}, H^{(j)}]$ berechnet werden, für die

$$i + j \leq O_{\text{Ziel}} \quad (4.1.3)$$

gilt. Bei der Berechnung dieser Kommutatorblöcke können neue Terme erzeugt werden, die in H berücksichtigt werden müssen. Dazu werden die Ordnungen dieser Terme benötigt. Diese Ordnungen bestimmen sich aus der niedrigsten Ordnung in der ein solcher Term entstehen kann. Deshalb wird diese Ordnung im Folgenden minimale Ordnung $O_{\min}$ genannt. Sie entspricht den n_i aus Gleichung 4.0.9.

Um die Ordnung der Terme und allgemein die Berechnung der Kommutatorblöcke effizient zu gestalten, wird die Berechnung iterativ durchgeführt. Dabei werden erst alle Terme des Hamiltonoperators und Beiträge des Differentialgleichungssystems in erster Ordnung bestimmt. Danach werden die der zweiten Ordnung, der dritten Ordnung und so weiter bis zur Zielordnung bestimmt. Dieses Vorgehen ist schematisch in Abbildung 4.1.1 dargestellt.

Dabei stehen die kleinen Quadrate für die einzelnen Kommutatorenblöcke und die Pfeile geben die Richtung der Iteration an. Mit diesem Vorgehen erhält man alle Terme mit zugehöriger minimaler Ordnung und das Differentialgleichungssystem in gewünschter Ordnung.

Wie diese Iteration genau vorgenommen wird, soll zunächst anhand eines Beispiels erläutert werden. Danach wird nochmals das Vorgehen allgemein skizziert. Als Beispiel soll die in Kapitel 3.1 beschriebene Spinleiter bis zur zweiten Ordnung berechnet werden.

Der Hamiltonoperator der Spinleiter ist gegeben durch Gleichung 3.1.10. Alle Terme des Hamiltonoperators zu Beginn und die, die während des Flusses erzeugt werden, stehen in Tabelle 4.1.1. Dabei wurde in dieser Tabelle schon die in Kapitel 3.1 erwähnten Symmetrien ausgenutzt, was an den Summen erkennbar ist. Dadurch verkleinert sich die Anzahl der zu berechnenden Koeffizienten. Die Nummerierung dieser Terme wird im folgenden Beispiel verwendet.

In der Tabelle stehen weiterhin die Koeffizienten bei $l = 0$ und die Störungsreihen dieser bei $l = \infty$. Diese Störungsreihen wurden mit der perturbativen Auswertung, welche in Kapitel 4.2 erläutert wird, bestimmt.

Weiterhin sind die minimalen Ordnungen angegeben. Die minimalen Ordnungen sind die Ordnungen, in der ein Term das erste Mal erzeugt wird oder durch den Starthamiltonoperator vorgegeben ist.

Zusätzlich stehen in der Tabelle die maximalen Ordnungen für die Grundzustandsenergie (0_{qp}) und den 1-Teilchenraum (1_{qp}). Auf diese wird in Kapitel 4.3 Bezug genommen. Sie sind erst für die Optimierungen von Belang.

i	$\hat{H}_i$	$h_i^{(n_i)}(0)$	$h_i^{(n_i)}(\infty)$	$O_{\min}$	$O_{\max}^{0\text{qp}}$	$O_{\max}^{1\text{qp}}$
0	$\sum_r \mathbb{1}$	$-3/4$	$-3/4 - 3x^2/8$	0	2	2
1	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r}$	1	$1 + 3x^2/4$	0	0	2
2	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\beta,r} t_{\beta,r+1}$	$-x/2$	$-x/2 + x^2/8$	1	0	0
3	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\beta,r} t_{\alpha,r+1}$	$x/2$	$x/2$	1	0	0
4	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}^\dagger + \text{h.c.}$	$x/2$	0	1	1	1
5	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1} + \text{h.c.}$	$x/2$	$x/2$	1	0	2
6	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r+2}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\beta,r+2} + t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0
7	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\beta,r+2}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + t_{\beta,r}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0
8	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+2}^\dagger + \text{h.c.}$	0	$-x^2/8$	2	0	2
9	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1} + \text{h.c.}$	0	$x^2/4$	2	0	0
10	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1} + \text{h.c.}$	0	$x^2/8$	2	0	0
11	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}$	0	$-x^2/4$	2	0	0
12	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}$	0	$-3x^2/8$	2	0	0
13	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\beta,r+2}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1} + \text{h.c.}$	0	$x^2/8$	2	0	0
14	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0
15	$\sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+2}^\dagger + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0
16	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0
17	$\sum_{r,\alpha \neq \beta} t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\alpha,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\beta,r+2} + t_{\alpha,r+1}^\dagger t_{\beta,r}^\dagger t_{\beta,r+1}^\dagger t_{\alpha,r+2} + \text{h.c.}$	0	0	2	0	0

Tabelle 4.1.1: Terme des effektiven Hamiltonoperators für die Spinleiter, die bei der EP-CUT Rechnung bis zur zweiten Ordnung erzeugt werden. Angegeben sind ein Index der Terme, die Operatoren $\hat{H}_i$ sowie deren Koeffizienten für $l = 0$ und $l = \infty$. Die Koeffizienten für $l = \infty$ sind die Störungsreihen aus der perturbativen Auswertung. Desweiteren ist die minimale Ordnung dieser Terme angeben. Die aus der Omax-Iteration (4.3.1) ermittelten maximalen Ordnungen sind für die Grundzustandsenergie und Dispersion bzw. nur für Grundzustandsenergie angegeben. Die grau schraffierten Terme tragen nicht zur jeweiligen Größe bei, weil hier $O_{\max} < O_{\min}$ gilt.

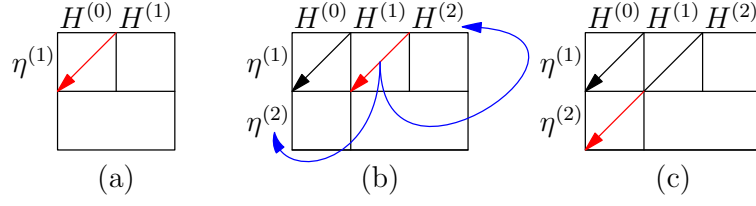


Abbildung 4.1.2: Schematische Darstellung der Berechnung des Flusses für die 2. Ordnung der Spinleiter. Teilabbildung (a) gibt den ersten Loop an. Dieser Loop berechnet alle Beiträge, die erster Ordnung sind. Hier werden keine neuen Terme erzeugt. Teilabbildung (b) gibt den ersten Kommutatorblock des zweiten Loops an. In dieser Berechnung werden neue Terme erzeugt, die in $H^{(2)}$ und $\eta^{(2)}$ hinzugefügt werden. Teilabbildung (c) gibt den zweiten Kommutatorblock des zweiten Loops an. Mit dieser Berechnung erhält man alle Beiträge, die 2. Ordnung sind.

Für die Spinleiter ist bei $l = 0$ der Generator von Term 4 zu

$$\eta(l=0) = h_4^{(n_4)}(l=0)\hat{\eta}_4 = h_4^{(n_4)}(l=0) \sum_{r,\alpha} (t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r+1}^\dagger - \text{h.c.}) \quad (4.1.4)$$

abgeleitet.

Die Berechnung jeder einzelnen Ordnung bei dieser iterativen Rechnung wird als Loop bezeichnet. Für die zweite Ordnung müssen also zwei Loops berechnet werden. Diese Berechnung ist schematisch in Abbildung 4.1.2 dargestellt. Anhand dieser Abbildung wird das Verfahren Schritt für Schritt erklärt.

Der erste Loop berechnet die erste Ordnung. Die in einem Loop bearbeitete Ordnung wird aktuelle Ordnung genannt. In Abbildung 4.1.2 (a) ist dieser Loop dargestellt. Hier muss der Kommutator

$$[\eta^{(1)}, H^{(0)}] \quad (4.1.5)$$

berechnet werden. Werden bei dieser Berechnung neue Terme erzeugt, so werden diese zum Operator $H^{(1)}$ hinzugefügt, da sie erster Ordnung sind. Deren minimale Ordnung beträgt also $n_{\text{neu}} = 1$. Sind die neuen Terme zusätzlich noch Generatortermine, müssen sie auch in $\eta^{(1)}$ hinzugefügt werden. Da im aktuellen Kommutator der Generatorblock der ersten Ordnung steht, müssen

die neuen Generatorenterme dort berücksichtigt werden. Dieser Kommutator muss also *selbstkonsistent* gelöst werden. Das bedeutet, dass dieser solange bearbeitet wird, bis keine neuen Terme mehr erzeugt werden. Im Fall der Spinleiter erhält man die folgenden Kommutatoren:

$$[\hat{\eta}_4, \hat{H}_0] = 0 \quad (4.1.6)$$

$$[\hat{\eta}_4, \hat{H}_1] = -2\hat{H}_4 \quad (4.1.7)$$

In diesem Fall wird kein neuer Term erzeugt, so dass dieser Block so schon vollständig berechnet worden ist. Dass keine neuen Terme erzeugt worden sind, liegt daran, dass in diesem Modell $H^{(0)}$ lokal und diagonal ist.

Ist diese Berechnung abgeschlossen, sind alle Terme erster Ordnung bekannt. Im nächsten Loop wird dann die zweite Ordnung berechnet. Hier müssen nun zwei Kommutatoren berechnet werden, siehe Abbildung 4.1.2 (b) und (c). Dabei wird mit dem Kommutator

$$[\eta^{(1)}, H^{(1)}] \quad (4.1.8)$$

begonnen. Treten bei dieser Berechnung neue Terme auf, sind sie zweiter Ordnung. Da im Kommutator aber nur Blöcke erster Ordnung stehen, muss dieser nur einmal berechnet werden und es ist keine Selbstkonsistenz notwendig. Neue Terme werden in $H^{(2)}$ hinzugefügt. Diese besitzen die minimale Ordnung von $n_{\text{neu}} = 2$. Sind unter den neuerzeugten Termen Generatorterme, werden sie in den Generatorblock $\eta^{(2)}$ eingefügt. Für die Spinleiter erhält man folgende Kommutatoren

$$[\hat{\eta}_4, \hat{H}_2] = -2\hat{H}_4 - \hat{H}_6 \quad (4.1.9)$$

$$[\hat{\eta}_4, \hat{H}_3] = -\hat{H}_7 \quad (4.1.10)$$

$$\begin{aligned} [\hat{\eta}_4, \hat{H}_4] = & -6\hat{H}_0 + 12\hat{H}_1 + 2\hat{H}_2 - 2\hat{H}_8 \\ & + 4\hat{\eta}_9 + 2\hat{H}_{10} - 4\hat{H}_{11} - 6\hat{H}_{12} + 2\hat{H}_{13} \end{aligned} \quad (4.1.11)$$

$$[\hat{\eta}_4, \hat{H}_5] = 4\hat{H}_{14} - 2\hat{H}_{15} + 2\hat{H}_{16} + \hat{H}_{17}. \quad (4.1.12)$$

In diesem Block wurden neue Terme erzeugt. Diese Terme müssen nun in

$H^{(2)}$ eingefügt werden. Sie erhalten als Koeffizienten für $l = 0$ den Wert $h_{\text{neu}}^{(2)}(l = 0) = 0$. Desweiteren sind auch neue Generatorenterme erzeugt worden. Die Terme 6,7,14,15,16 und 17 müssen zusätzlich in $\eta^{(2)}$ eingefügt werden.

Ist die Berechnung des (1,1)-Block abgeschlossen, muss noch der Kommutator

$$[\eta^{(2)}, H^{(0)}] \quad (4.1.13)$$

selbstkonsistent berechnet werden. Für die Spinleiter ergibt sich für diesen Block:

$$[\hat{\eta}_i, \hat{H}_0] = 0 \quad (4.1.14)$$

$$[\hat{\eta}_i, \hat{H}_1] = -2\hat{H}_i \quad (4.1.15)$$

mit $i \in \{6, 7, 14, 15, 16, 17\}$. Damit sind alle Terme zweiter Ordnung bestimmt. Tabelle 4.1.1 zeigt alle Terme bis zur 2. Ordnung für die Spinleiter. Durch einen Koeffizientenvergleich lässt sich auf das Differentialgleichungssystem schließen, wobei

$$\sum_i M_{i,j,k} \hat{H}_i = [\hat{\eta}_j, \hat{H}_k] \quad (4.1.16)$$

verwendet wird. Die $M_{i,j,k}$ sind die aus der Kommutatorberechnung folgenden Beiträge zum Differentialgleichungssystem. Sie sind für die zweite Ordnung in Tabelle 4.1.2 angegeben.

i	j	k	M_{ijk}
0	4	4	-6
1	4	4	12
2	4	4	2
4	1	4	-2
4	2	4	-2
6	1	6	-2
6	2	4	-1
7	1	7	-2
7	3	4	-1
8	4	4	-2
9	4	4	4
10	4	4	2
11	4	4	-4
12	4	4	-6
13	4	4	2
14	1	14	-2
14	4	5	4
15	1	15	-2
15	4	5	-2
16	1	16	-2
16	4	5	2
17	1	17	-2
17	4	5	1

Tabelle 4.1.2: Nicht verschwindende Beiträge des Differentialgleichungssystems der Spinleiter in zweiter Ordnung. Die schraffierten Flächen geben die Beiträge an, die für die Grundzustandsenergie und Dispersion (dunkelgrau) bzw. nur für die Grundzustandsenergie (hellgrau) *nicht* benötigt werden.

In dieser Tabelle sind desweiteren auch die Reduzierungen dieses Systems, welche in Kapitel 4.3 erläutert werden, farblich gekennzeichnet.

Allgemein lässt sich das Aufstellen des Differentialgleichungssystems wie folgt beschreiben.

Die Zielordnung wird iterativ gelöst. Man startet bei der 1. Ordnung und berechnet Schritt für Schritt alle Ordnungen bis zur gewünschten Zielordnung. Bei der Berechnung einer aktuellen Ordnung müssen die Kommutatoren

$$[\eta^{(i)}, H^{(\text{aktuelle Ordnung}-i)}] \quad (4.1.17)$$

berechnet werden. Dabei wird bei $i = 1$ gestartet, danach $i = 2$ berechnet und weitergeführt bis einschließlich i gleich der aktuellen Ordnung ist. Dabei muss der Kommutator

$$[\eta^{(\text{aktuelle Ordnung})}, H^{(0)}] \quad (4.1.18)$$

selbstkonsistent gelöst werden, weil aus ihm resultierende Terme zu $\eta^{(\text{aktuelle Ordnung})}$ beitragen können.

Werden bei diesen Berechnungen neue Terme erzeugt, so gelten für diese folgende Eigenschaften:

1. Die Ordnung, in der ein neuer Term zum ersten mal erzeugt wird, wird minimale Ordnung genannt und mit $O_{\min}$ bezeichnet.
2. Für die Koeffizienten dieser Terme gilt, dass sie bei $l = 0$ verschwinden.

Um nun das Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten zu bestimmen, werden die Operatorprodukte normalgeordnet. Aus einem Koeffizientenvergleich ergibt sich ein Gleichungssystem der Form

$$\partial_l h_i^{(n_i)}(l) = \sum_{j,k} M_{i,j,k} h_j^{(n_j)}(l) h_k^{(n_k)}(l). \quad (4.1.19)$$

Dabei steht $M_{i,j,k}$ für die aus der Kommutatorrechnung bestimmten Vorfaktoren.

Wie man dieses System nun auswerten und das Aufstellen der Flussgleichung technisch optimieren kann, erklären die folgenden Kapitel.

4.2 Perturbative Auswertung

Das in Gleichung 4.1.19 aufgestellte Differentialgleichungssystem soll nun perturbativ gelöst werden. Dazu wird für jeden Koeffizienten $h_i^{(n_i)}$ eine Reihe im Entwicklungsparameter x angesetzt. Der Entwicklungsparameter entspricht in dieser Auswertung einem Störparameter. Damit ergeben sich für

die Koeffizienten die Reihen

$$h_i^{(n_i)}(l) = \sum_{j=n_i}^{O_{\text{Ziel}}} f_i^{(j)}(l) x^j. \quad (4.2.1)$$

Dabei ist der Koeffizient $f_i^{(j)}$ l -abhängig, der Entwicklungsparameter x hingegen nicht. Diesen Ansatz setzt man in das Differentialgleichungssystem aus Gleichung 4.0.11 ein und erhält

$$\partial_l \sum_{r=n_i}^{O_{\text{Ziel}}} f_i^{(r)}(l) x^r = \sum_{j,k} M_{i,j,k} \sum_{p=n_j, q=n_k}^{O_{\text{Ziel}}} x^{p+q} f_j^{(p)} f_k^{(q)}. \quad (4.2.2)$$

Aus diesem Ausdruck lässt sich mittels Koeffizientenvergleichs das Differentialgleichungssystem für die einzelnen Koeffizienten $f_i^{(r)}$ bestimmen. Verglichen werden die Koeffizienten, die in derselben Ordnung in x sind, für die also $r = p + q$ gilt. Dies führt zu einem Differentialgleichungssystem der Form

$$\partial f_i^{(r)}(l) = \sum_{k,l,r=p+q} M_{i,j,k} f_j^{(p)}(l) f_k^{(q)}(l). \quad (4.2.3)$$

Dieses System ist im Vergleich zu Gleichung 4.1.19 sehr stark vergrößert, da jeder Koeffizient $h_i^{(n_i)}$ als Reihe aufgefächert wird.

Das so aufgestellte Differentialgleichungssystem zeigt eine Hierarchie zwischen den Koeffizienten $f(l)$. Der Koeffizient auf der linken Seite wird nur von Koeffizienten beeinflusst, die eine geringe oder die gleiche Ordnung haben. Der Fall der gleichen Ordnung tritt nur ein, wenn ein Koeffizient der rechten Seite nullter Ordnung ist. Dies bedeutet anschaulich, dass die Koeffizienten höherer Ordnung die mit niedrigen Ordnungen nicht beeinflussen.

Aufgrund der Hierarchie des Differentialgleichungssystems und der Beschaffenheit von $H^{(0)}$ konvergiert das Differentialgleichungssystem immer. Der Term $h_1^{(0)} \sum_{r,\alpha} t_{\alpha,r}^\dagger t_{\alpha,r}$ aus $H^{(0)}$ sorgt dafür, dass jeder Koeffizient $f_i^{(r)}(l)$ eines Generatorterms von dem selben Koeffizienten $f_i^{(r)}(l)$ in gleicher Ordnung beeinflusst

wird und der Beitrag aus dem M_{ii1} negativ ist. Es gilt

$$\partial_l f_{i,\text{Generator}}^{(r)} = -2f_{i,\text{Generator}}^{(r)} f_1^{(0)} + \dots, \quad (4.2.4)$$

wobei zu berücksichtigen ist, dass $f_1^{(0)}(l)$ konstant ist. Diese Eigenschaften sorgen dafür, dass das Differentialgleichungssystem konvergiert. Dass die Eigenschaften wirklich zur Konvergenz führen, soll im Folgenden anhand der Spinleiter in zweiter Ordnung skizziert werden. Dazu werden die Koeffizienten des Generatorterms 4, siehe Tabelle 4.1.1, aus dem Differentialgleichungssystem, siehe Tabelle 4.1.2, analytisch berechnet.

Für den Generatorterm 4 lässt sich der Koeffizienten $f_4^{(1)}(l)$ aus

$$\partial_l f_4^{(1)}(l) = -2f_4^{(1)}(l)f_1^{(0)}(l) \quad (4.2.5)$$

zu

$$f_4^{(1)}(l) = \frac{1}{2}e^{-2l} \quad (4.2.6)$$

berechnen, da $f_1^{(0)}(l) = 1$ und M_{441} negativ ist. Aus dem Differentialgleichungssystem der Spinleiter folgt trivialerweise, dass

$$f_1^{(1)}(l) = 0 \quad (4.2.7)$$

$$f_2^{(1)}(l) = -\frac{1}{2} \quad (4.2.8)$$

ist. Mit diesen Informationen lässt sich der Koeffizient $f_4^{(2)}(l)$ aus

$$\partial_l f_4^{(2)}(l) = -2f_4^{(2)}(l) \underbrace{f_1^{(0)}(l)}_{=1} - 2f_4^{(1)}(l) \underbrace{f_1^{(1)}(l)}_{=0} - 2 \underbrace{f_4^{(1)}(l)}_{=\frac{1}{2}e^{-2l}} \underbrace{f_2^{(1)}(l)}_{=-\frac{1}{2}} \quad (4.2.9)$$

$$= -2f_4^{(2)}(l) + \frac{1}{2}e^{-2l} \quad (4.2.10)$$

zu

$$f_4^{(2)}(l) = \frac{1}{2}le^{-2l} \quad (4.2.11)$$

bestimmen. Wie man sieht, beinhaltet die Gleichung 4.2.10 einen Beitrag mit dem Koeffizienten der selben Ordnung und als zweiten Beitrag eine exponentiell abfallende Funktion in l . Aufgrund des ersten Beitrags folgt, dass auch der Koeffizient $f_4^{(2)}(l)$ exponentiell abfällt. Für höhere Ordnungen und andere Generatorenterme erhält man immer eine ähnliche Struktur bei den Rechnungen, so dass die Generatorenterme immer exponentiell abfallen. Damit konvergiert das Differentialgleichungssystem immer.

Um die Koeffizienten zu bestimmen muss dieses Differentialgleichungssystem integriert werden. In dieser Arbeit wird dazu ein Runge-Kutta-Algorithmus verwendet. Die Startwerte dieses Systems werden über den initialen Hamiltonoperator bestimmt. Löst man dieses System, so erhält man für $l = \infty$ einen effektiven Hamiltonoperator der Form

$$H_{\text{eff}} = \sum_i \left(\sum_{j=O_{\min}}^{O_{\text{Ziel}}} f_i^{(j)}(\infty) x^j \right) \hat{H}_i. \quad (4.2.12)$$

Es ergibt sich für jeden Koeffizienten eine Störungsreihe in x und damit eine perturbative Darstellung von H_{eff} . Die Reihen dieser Darstellung für die Spinleiter in 2. Ordnung stehen in Tabelle 4.1.1.

Da diese Reihen Störungsreihen sind, divergieren sie für große x -Werte. Deshalb müssen diese in der späteren Auswertung extrapoliert werden. Die in dieser Arbeit verwendeten Extrapolationsmethoden sind in Kapitel 7.1 aufgeführt und kurz erläutert.

Die hier vorgestellte perturbative Auswertung ist eine Verbesserung der P-CUT, da weder beim Aufstellen noch beim Lösen des Differentialgleichungssystems der Hamiltonoperator wie bei der P-CUT eingeschränkt worden ist. Die einzige Voraussetzung bei dieser Methode war ein lokales und diagonales $H^{(0)}$.

Auch diese Bedingung ist aber nicht zwingend für die Anwendbarkeit der EP-CUT [28]. Ist die Bedingung nicht erfüllt, müssen jedoch die folgenden Punkte berücksichtigt werden, damit die CUT funktioniert:

Ist $H^{(0)}$ nicht diagonal, so existiert auch ein Generatorblock $\eta^{(0)}$ in nullter

Ordnung. Dadurch erhält man zusätzlich Kommutatoren der Form

$$[\eta^{(0)}, H^{(i)}], \quad (4.2.13)$$

welche wieder selbstkonsistent gelöst werden müssen. Um nun alle Terme zu erhalten, müssen in diesen Fall die selbstkonsistenten Blöcke abwechselnd berechnet werden, bis diese auskonvergiert sind. Davor werden alle anderen Blöcke im jeweiligen Loop berechnet.

Sollte $H^{(0)}$ nicht lokal sein, so kann die Selbstkonsistenz möglicherweise nicht mehr erreicht werden. Ähnlich zur S-CUT müssen diese Kommutatorblöcke zusätzlich trunziert werden, damit sich das Differentialgleichungssystem schließt.

4.3 Optimierung

Es ist sehr aufwendig, den kompletten effektiven Hamiltonoperator in hoher Ordnung zu bestimmen. Dies liegt daran, dass der effektive Hamiltonoperator sehr viele Terme beinhaltet. Aufgrund der Trunkierung besitzt der Hamiltonoperator alle Wechselwirkungen, die bis einschließlich der Zielordnung möglich sind. Als Beispiel für die möglichen Terme einer Ordnung soll die in Kapitel 3 vorgestellte Spinleiter dienen. Die möglichen Wechselwirkungen in zweiter Ordnung, welche in Kapitel 4.1 berechnet worden sind, sind in Tabelle 4.1.1 angegeben. Es sind also alle Terme möglich, in denen zum Beispiel die Quasiteilchen in Summe zwei Plätze hüpfen können. Mit ansteigender Ordnung erhöht sich die Anzahl der möglichen Wechselwirkungen. So sind zum Beispiel in achter Ordnung alle Terme möglich, in dem die Quasiteilchen in Summe acht Plätze hüpfen können. Daher hat der Hamiltonoperator für hohe Ordnungen sehr viele Terme. Der Anstieg der Anzahl der Terme ist in Abbildung 4.3.1 dargestellt.

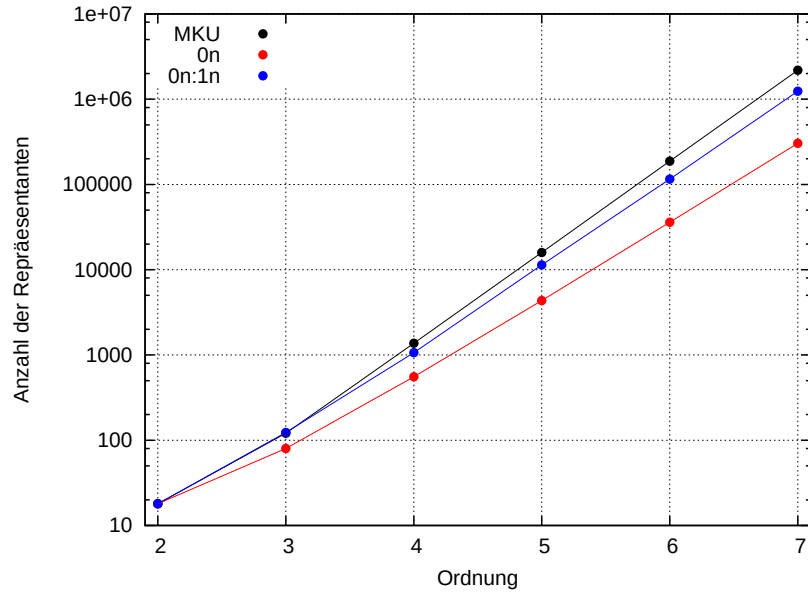


Abbildung 4.3.1: Dargestellt sind die Anzahl der Repräsentanten als Funktion der Ordnung. Es sind die Daten für den MKU, den 0n und den 0n:1n-Generator aufgetragen.

Es sind die Anzahl der Repräsentanten der Symmetriegruppen, siehe Kapitel 3.1, gegen die Ordnung für verschiedene Generatoren aufgetragen. Wie man erkennt, steigt ihre Anzahl für alle Generatoren exponentiell an. Dies hat zur Auswirkung, dass der numerische Aufwand beim Erzeugen dieses Hamiltonoperators sehr groß ist, so dass hohe Ordnungen nicht oder nur sehr aufwendig erreicht werden können.

Die erste Möglichkeit, das System zu verkleinern, ist die schon angewandte Ausnutzung (Tab. 4.1.1 bzw. Abb. 4.3.1) der Symmetrien. Mit Hilfe dieser lassen sich die Operatoren in Symmetriegruppen des Hamiltonoperators einteilen [16], die alle denselben Koeffizienten haben. Dadurch muss dieser nur einmal berechnet werden. Die benutzen Symmetrien beider Spinleitermodelle sind in Kapitel 3.1 aufgeführt. Diese Symmetrien reduzieren die Anzahl der Koeffizienten um einen Faktor von ungefähr 24.

Die EP-CUT mit dem MKU-Generator und den Symmetrien ist für die Spinleiter aufgrund des numerischen Aufwandes nur bis zur siebten Ordnung

durchführbar. Möchte man höhere Ordnungen erreichen, so müssen weitere Optimierungen verwendet werden. Diese Optimierungen werden im Folgenden vorgestellt und diskutiert.

Ist man nicht an dem ganzen effektiven Hamiltonoperator interessiert, sondern nur an dem Nullteilchenraum (Grundzustandsenergie) und an dem Einteilchenraum (Dispersion), so kann man mit den geeigneten Generatoren die CUT weiter optimieren. Dazu werden in dieser Arbeit die in Kapitel 2.2.3 vorgestellten MKU-Varianten verwendet. Diese reduzieren schon merklich die Anzahl der benötigten Terme, wie man an Abbildung 4.3.1 erkennt.

Die bisher vorgestellten Optimierungen sind unabhängig von der Methode, sie gelten zum Beispiel auch für die S-CUT. Es existieren zusätzlich zu diesen weitere Optimierungen, die speziell für die EP-CUT gelten. Diese Optimierungen sparen beim Erstellen und beim Auswerten des Differentialgleichungssystems erheblich Rechenzeit und Arbeitsspeicher. Man erreicht mit ihnen für die Grundzustandsenergie der Spinleiter (alternierende Spinleiter) die 17. (16.) Ordnung und für den 1-Teilchenraum die 15. (13.) Ordnung.

Im Folgenden werden diese EP-CUT spezifischen Optimierungen vorgestellt und wieder anhand der Spinleiter in zweiter Ordnung beispielhaft erörtert. Voraussetzung für diese Optimierungen ist es, dass nicht der gesamte effektive Hamiltonoperator bis zur Zielordnung exakt bestimmt werden soll. Es sollen nur bestimmte Größen wie die Grundzustandsenergie oder die Dispersion exakt bis zur Zielordnung beschrieben werden. Das heißt, dass man nur für diese Terme alle Koeffizienten der jeweiligen Reihe

$$h_i^{(n_i)}(l) = \sum_{j=n_i}^{O_{\text{Ziel}}} f_i^{(j)}(l) x^j \quad (4.3.1)$$

bestimmen muss. Im weiteren Verlauf der Arbeit werden die n_i in der Bezeichnung der Übersicht halber weggelassen. Da aber das Differentialgleichungssystem der perturbativen Auswertung, siehe Gleichung 4.2.3, eine Hierarchie in der Ordnung zeigt, muss man nicht jeden Term bis zur Zielordnung bestimmen, um die gesuchten Größen bis O_{Ziel} zu bestimmen. Man braucht also jeden Term nur bis zu einer bestimmten Ordnung exakt kennen, da höhere

Ordnungen der Terme die gesuchten Größen nicht bis zur Zielordnung beeinflussen. Die höchste Ordnung, bis zu der ein Term berechnet werden muss, wird maximale Ordnung $O_{\max}$ genannt.

Die Idee der neuen Optimierungen ist es, mit Hilfe der maximalen und minimalen Ordnungen zu bestimmen, ob ein Term überhaupt zur gesuchten Größe beiträgt.

Für die maximale Ordnung eines Terms gilt trivialerweise

$$O_{\max}(h_i) \leq O_{\text{Ziel}} . \quad (4.3.2)$$

Für die zu untersuchenden Größen gilt der Fall

$$O_{\max}(h_i) = O_{\text{Ziel}} , \quad (4.3.3)$$

wenn man den gesamten effektiven Hamiltonoperator bestimmen wollte, würden alle Terme gleich der Zielordnung sein.

Interessant ist nun der Fall, wenn für Terme

$$O_{\max}(h_i) < O_{\min}(h_i) \quad (4.3.4)$$

gilt. Dies bedeutet, dass dieser Term nicht zur gesuchten Größe beiträgt. Solche Terme können aus dem Differentialgleichungssystem gelöscht werden. Die Beiträge des Differentialgleichungssystems, in denen ein solcher Term auf der rechten Seite zu einem bilinearen Term beiträgt, können auch gelöscht werden. Desweiteren ist es auch möglich, dass für einen Beitrag des Differentialgleichungssystems

$$\partial_l h_i(l) = \sum_{j,k} M_{i,j,k} h_j(l) h_k(l) \quad (4.3.5)$$

die Ungleichung

$$O_{\max}(h_i) < O_{\min}(h_j) + O_{\min}(h_k) \quad (4.3.6)$$

gilt. Diese Beiträge tragen auch nicht bei und können ebenfalls gelöscht wer-

den.

Diese Überlegungen sorgen für eine wesentliche Verkleinerung des Differentialgleichungssystems. Jedoch kann man die maximalen Ordnungen nur bestimmen, wenn das komplette Differentialgleichungssystem vorliegt. Die maximalen Ordnungen der Spinleiter in zweiter Ordnung für die Grundzustandsenergie und der Dispersion sind in Tabelle 4.1.1 angegeben und die daraus folgende Reduzierung des Differentialgleichungssystems ist in Tabelle 4.1.2 farblich gekennzeichnet.

Das Vorgehen bei der $O_{\max}$ -Bestimmung und der daraus folgende Reduzierung des Differentialgleichungssystems soll im Folgenden für die Grundzustandsenergie der Spinleiter in zweiter Ordnung beispielhaft dargestellt werden.

Für den Koeffizient h_0 gilt

$$O_{\max}(h_0) = 2. \quad (4.3.7)$$

Da bis auf h_4 kein Koeffizient h_0 direkt beeinflusst, lässt sich die maximale Ordnung von h_4 direkt aus dem Differentialgleichungsbeitrag

$$\partial_l h_0(l) = -6h_4(l)h_4(l) \quad (4.3.8)$$

bestimmen. Die maximale Ordnung des Koeffizienten h_4 ist durch

$$O_{\max}(h_4) = O_{\max}(h_0) - O_{\min}(h_4) = 2 - 1 = 1 \quad (4.3.9)$$

gegeben. Jede höhere Ordnung von h_4 als die erste liefert einen Beitrag, der die Grundzustandsenergie in einer größeren Ordnung als der zweiten beeinflusst.

Auch die maximalen Ordnungen der anderen Koeffizienten lassen sich aus dem Differentialgleichungssystem bestimmen. Da kein anderer Koeffizient h_0 direkt beeinflusst, muss das $O_{\max}$ dieser aus den schon bekannten maximalen Ordnungen berechnet werden. Dabei muss beachtet werden, dass bei mehreren Möglichkeiten zur Berechnung der maximalen Ordnung immer die höchste resultierende Ordnung als maximale Ordnung verwendet wird. Für

h_1 wird deshalb der Differentialgleichungsbeitrag

$$\partial_l h_4(l) = -2h_4(l)h_1(l) \quad (4.3.10)$$

angesehen. Daraus ergibt sich für h_1

$$O_{\max}(h_1) = O_{\max}(h_4) - O_{\min}(h_4) = 1 - 1 = 0. \quad (4.3.11)$$

Die maximale Ordnung des Terms h_2 lässt sich aus dem Differentialgleichungsbeitrag

$$\partial_l h_4(l) = -2h_4(l)h_2(l) \quad (4.3.12)$$

zu

$$O_{\max}(h_2) = O_{\max}(h_4) - O_{\min}(h_4) = 1 - 1 = 0 \quad (4.3.13)$$

bestimmen. Da hier $O_{\max}(h_2) < O_{\min}(h_2)$ gilt, muss dieser Koeffizient aus dem Differentialgleichungssystem gelöscht werden.

Analog zu den hier skizzierten Vorgehen, lassen sich die maximalen Ordnungen aller Koeffizienten aus der Tabelle 4.1.1 bestimmen und das Differentialgleichungssystem nach Gleichung 4.3.4 reduzieren.

Der Beitrag

$$\partial_l h_1(l) = 12h_4(l)h_4(l) \quad (4.3.14)$$

trägt zusätzlich nicht bei, da hier

$$O_{\max}(h_1) < O_{\min}(h_4) + O_{\min}(h_4) \quad (4.3.15)$$

gilt.

Mit diesen Verfahren reduziert sich das Differentialgleichungssystem merklich. In Tabelle 4.1.1 und 4.1.2 sind die Terme, die nicht zu Grundzustandsenergie beitragen, hellgrau schraffiert.

Diese Überlegungen lassen sich auch für alle anderen Teilchenräume, wie

zum Beispiel dem Einteilchenraum, durchführen. Bei dem Einteilchenraum werden alle Terme dieses Raumes bis zur Zielordnung mitgenommen. Die Reduzierung für den Einteilchenraum ist in Tabelle 4.1.1 und 4.1.2 dunkelgrau markiert.

Die systematische $O_{\max}$ -Bestimmung läuft iterativ über die folgende selbstkonsistente Gleichung

$$O_{\max}(h_j) = \max_{\{i,k|M_{i,j,k} \neq 0\}} [O_{\max}(h_i) - O_{\min}(h_k)], \quad (4.3.16)$$

wobei i, j, k und $M_{i,j,k}$ aus der Definition von Gleichung 4.0.9 verwendet wird. Diese Gleichung lässt sich iterativ lösen und damit die maximalen Ordnungen bestimmen. Wichtig hierbei ist es, dass die maximale Ordnung nur dann genau bestimmt werden kann, wenn das komplette Differentialgleichungssystem vorliegt. Eine genaue Herleitung und Erörterungen zur technischen Umsetzung dieser $O_{\max}$ -Iteration findet sich in Kapitel 4.3.1.

Wie gezeigt, erhält man durch diese Überlegungen ein stark reduziertes Differentialgleichungssystem und damit auch eine stark verkürzte Rechenzeit bei der Auswertung. Die perturbative Auswertung ändert sich dahingehend, dass in Gleichung 4.2.3 die Summation nur noch bis zur maximalen Ordnung läuft und nicht mehr bis zur Zielordnung.

Würde man schon beim Aufstellen des Differentialgleichungssystems Kenntnis über die maximalen Ordnungen der jeweiligen Terme haben, könnte man vor der Kommutatorrechnung entscheiden, ob dieser überhaupt berechnet werden muss oder nicht. Das Ergebnis des Kommutators muss nicht zur gesuchten Größe beitragen. Damit ließe sich viel Rechenzeit und Arbeitsspeicher sparen. Jedoch kann man die genauen maximalen Ordnungen nur bestimmen, wenn das Differentialgleichungssystem aufgestellt worden ist. Man hat aber die Möglichkeit die maximalen Ordnungen abzuschätzen. Für diese Abschätzung lassen sich Auswahlregeln formulieren, welche in Kapitel 4.3.2 genauer erläutert werden. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten, wann man eine Abschätzung durchführt.

Zum einen kann man *vor* der Kommutatorberechnung die maximale Ordnung des Kommutatorergebnisses abschätzen. Diese Abschätzung wird in den a-

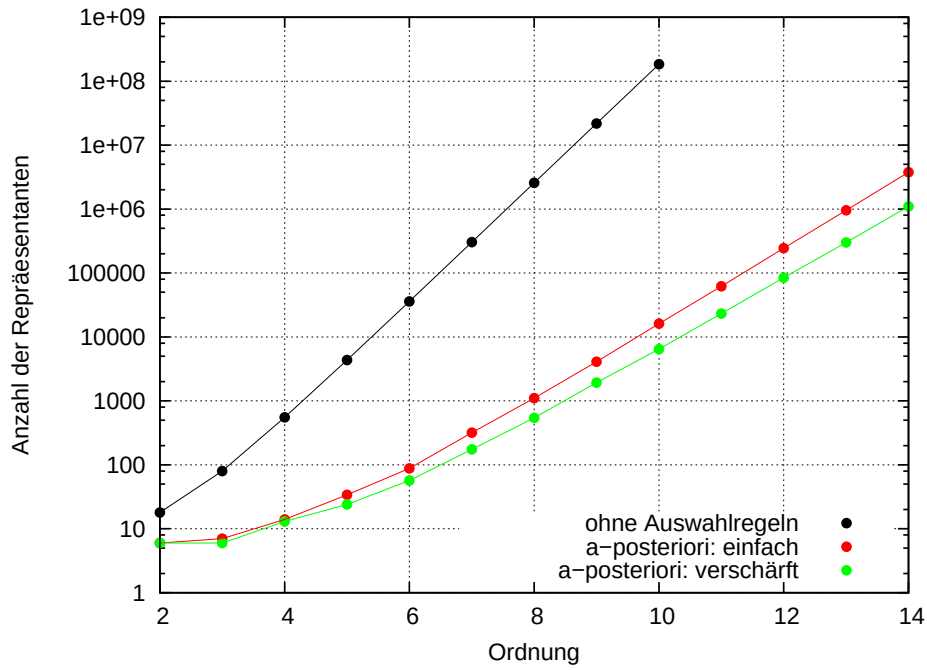
priori Regeln formuliert. Ist die abgeschätzte maximale Ordnung kleiner als die minimale Ordnung, so muss der Kommutator nicht mehr berechnet werden. Durch diese Regel wird die Rechenzeit verkürzt.

Zum Anderen kann die maximale Ordnung jedes Terms vor dem Einfügen in den Hamiltonoperator, also *nach* der Kommutatorberechnung, abgeschätzt werden. Diese Abschätzungen werden in den a-posteriori Regeln formuliert. Ist auch hier die maximale Ordnung kleiner als die minimale Ordnung, so muss dieser Term nicht in den Hamiltonoperator eingefügt werden. Mit diesen Regeln reduziert man den Arbeitsspeicheraufwand erheblich.

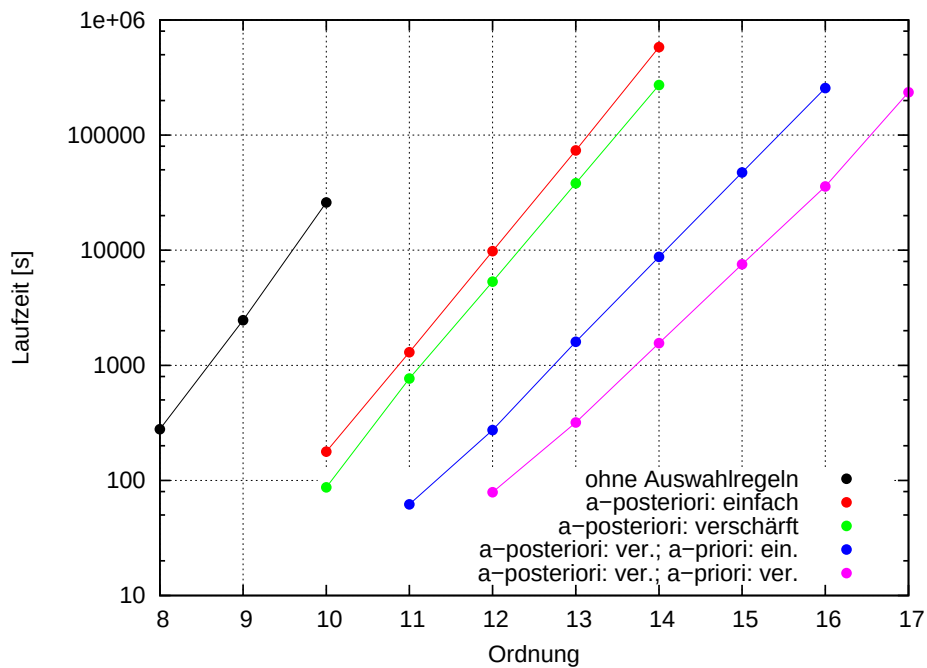
Die erzielten Einsparungen an Rechenzeit und Speicherbedarf, hier dargestellt durch die Reduzierung der Repräsentanten des Hamiltonoperators, sind in Abbildung 4.3.2 für den 0n-Generator aufgetragen. Beim Aufstellen der Differentialgleichungssysteme wurde ein Intel Xeon Prozessor mit 2.33 GHz verwendet.

Wie man in den Abbildungen erkennt, ist die Einsparung durch diese Regeln sehr groß. Dadurch lassen sich überhaupt erst sehr hohe Ordnungen erreichen. Wie in Kapitel 4.3.2 erläutert wird, kann man die Auswahlregeln an das jeweilige Modell anpassen, um so noch bessere Ergebnisse zu erhalten. Eine solche Anpassung für die Spinleiter ist in den erweiterten a-posteriori Regeln eingebaut. Wie man in Abbildung 4.3.2 erkennt, ist auch hier eine Verbesserung zu den normalen a-posteriori Regeln signifikant.

Das durch die Auswahlregeln minimierte Differentialgleichungssystem lässt sich nun natürlich noch mit der $O_{\max}$ -Iteration, zum minimalen Differentialgleichungssystem reduzieren. Dieses minimale Differentialgleichungssystem ermöglicht eine weitere Auswertungsart, die sogenannte direkte Auswertung. Diese ist eine nicht perturbative Auswertung ähnlich zur S-CUT und wird in Kapitel 4.4 vorgestellt.



(a)



(b)

Abbildung 4.3.2: Abgebildet sind in (a) Anzahlen der Repräsentanten und in (b) die Laufzeit der CUT in Sekunden für verschiedene Auswahlregeln. Dabei werden auch unterschiedlich genaue Auswahlregeln eines Typs verwendet. Diese werden in Kapitel 4.3.2 erläutert.

4.3.1 $O_{\max}$ -Iteration

Ist das Differentialgleichungssystem bekannt, so lassen sich die maximalen Ordnungen jedes Termes mit Hilfe der $O_{\max}$ -Iteration bestimmen. In diesem Kapitel wird die Idee und Umsetzung dieser Iteration erläutert.

Als Startpunkt für diese wird das komplette Differentialgleichungssystem benötigt. Es hat die Form

$$\partial_l h_i(l) = \sum_{j,k} M_{i,j,k} h_j(l) h_k(l). \quad (4.3.17)$$

Desweiteren kennt man die minimalen Ordnungen jeden Terms. Um auf die maximalen Ordnungen zu schließen, macht man folgende Überlegungen.

Die zu untersuchenden Größen sollen bis zur Zielordnung beschrieben werden. Für die Grundzustandsenergie, für welche diese Iteration erstmal erklärt wird, gilt also $O_{\max}(h_0) = O_{\text{Ziel}}$. Um die maximalen Ordnungen der anderen Terme zu bestimmen, sieht man sich erst alle Beiträge mit $M_{0,j,k} \neq 0$ an. Für die Termen mit $M_{0,j,k} \neq 0$ ist die maximale Ordnung durch

$$O_{\max}(h_j) = O_{\text{Ziel}} - \min_{\{k|M_{0jk} \neq 0\}} O_{\min}(h_k) \quad (4.3.18)$$

gegeben. Mit dieser Überlegung lassen sich jedoch nicht die $O_{\max}$ der Terme bestimmen, bei denen kein $M_{0,j,k} \neq 0$ ist. Für diese Terme lässt sich aber dieses Verfahren iterieren, da sie von den anderen Termen abhängen, deren $O_{\max}$ schon bekannt ist. Dies führt auf die Gleichung

$$O_{\max}(h_j) = \max_{\{i,k|M_{i,j,k} \neq 0\}} [O_{\max}(h_i) - O_{\min}(h_k)]. \quad (4.3.19)$$

Diese Gleichung ist eine selbstkonsistente Gleichung, da auf der linken und rechten Seite $O_{\max}$ vorkommt. Diese Gleichung kann iterativ gelöst werden. Dieses Verfahren gilt natürlich auch für andere Größen. Dabei müssen diese auch mit $O_{\max}(h_i) = O_{\text{Ziel}}$ gesetzt werden, wobei i für alle interessierende Terme steht.

Um die maximalen Ordnungen praktisch zu bestimmen wird die Iteration

wie folgt durchgeführt.

Zu Beginn werden die maximalen Ordnungen aller interessierenden Terme auf die Zielordnung gesetzt. Die übrigen Terme werden auf $O_{\max} = 0$ initialisiert. Als nächstes wird das Differentialgleichungssystem durchgegangen und für jeden bilinearen Term mit $M_{ijk} \neq 0$ die maximale Ordnung $O'_{\max}$ durch.

$$O'_{\max}(h_j) = O_{\max}(h_i) - O_{\min}(h_k) \quad (4.3.20)$$

$$O'_{\max}(h_k) = O_{\max}(h_i) - O_{\min}(h_j) \quad (4.3.21)$$

bestimmt. Gilt nun

$$O'_{\max}(h_j) > O_{\max}(h_j) \quad \text{bzw.} \quad O'_{\max}(h_k) > O_{\max}(h_k), \quad (4.3.22)$$

so wird die maximale Ordnung durch $O'_{\max}$ ersetzt. Sollte dies nicht gelten, so wird die aktuelle maximale Ordnung beibehalten. Dies wird solange iteriert, bis die Rechnung konvergiert. Damit sind nun alle maximalen Ordnungen aller Terme bestimmt.

4.3.2 Auswahlregeln

In diesem Kapitel werden die Ideen der Auswahlregeln erläutert. Wie in Kapitel 4.3 erwähnt, wird zwischen zwei Arten von Regeln unterschieden. Zum Einen die a-posteriori Regeln, welche nach der Kommutatorrechnung angewandt werden, und zum Anderen die a-priori-Regeln, welche vor der Kommutatorberechnung angewandt werden.

4.3.2.1 A-posteriori Regeln

Zunächst einmal werden die a-posteriori-Regeln erläutert. Mit Hilfe dieser Regeln lassen sich die maximalen Ordnungen von Termen abschätzen. Mit Hilfe dieser Ordnungen kann man entscheiden, ob ein Term in den Hamiltonoperator aufgenommen werden muss. Gilt $O_{\max}(h_i) < O_{\min}(h_i)$ so muss er nicht in den Hamiltonoperator aufgenommen werden.

Eine einfache jedoch allgemeingültige Abschätzung ist in der *einfachen a-*

posteriori-Regel formuliert. Die *verschärfte* a-posteriori-Regel liefert eine schärfere, jedoch modellspezifische, Abschätzung. Beide Regeln werden im Folgenden für das Spinleitermodell erläutert.

Die einfache a-posteriori-Regel wird zunächst anhand der Grundzustandsenergie erläutert und dann auf den k -Teilchenraum verallgemeinert.

Ein beliebiger Term des Hamiltonoperators sei mit $H_{j,n}$ bezeichnet, wobei n die Anzahl der Vernichtungs- und j die Anzahl der Erzeugungsoperatoren angibt. Damit ein solcher Term einen Effekt auf die Grundzustandsenergie haben kann, müssen j Teilchen abgebaut und n Teilchen erzeugt werden. Die in der Ordnung günstigste Anregung (Vernichtung) ist im Spinleitermodell eine paarweise Anregung (Vernichtung). Diese ist in $O(x)$ möglich, so dass man die Abschätzung

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq O_{\text{Ziel}} - \left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{j+1}{2} \right\rfloor \quad (4.3.23)$$

treffen kann. Dabei steht $\lfloor x \rfloor$ für die größte ganze Zahl kleiner gleich x . Diese Regel ist strikt genommen nicht ganz modellunabhängig, da hier verwendet worden ist, dass im Spinleitermodell eine paarweise Anregung (Vernichtung) in $O(x)$ möglich ist. Jedoch lässt sich diese Überlegung auch auf andere Modelle analog anwenden, man benötigt nur die in der Ordnung günstigste Anregung (Vernichtung) und muss die Gleichung 4.3.23 dementsprechend anpassen.

Diese Idee lässt sich auch für die höheren Teilchenräume formulieren. Für den 1-Teilchenraum müssen nicht j Triplonen abgebaut werden, sondern $j' = j - 1$. Es müssen auch anstatt n nur noch $n' = n - 1$ Teilchen erzeugt werden. Damit lässt sich die Auswahlregel zu

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq O_{\text{Ziel}} - \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{j}{2} \right\rfloor \quad (4.3.24)$$

bestimmen.

Allgemein gilt für den k -Teilchenraum

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq \quad (4.3.25)$$

$$O_{\text{Ziel}} - \max \left[\left\lfloor \frac{n+1-k}{2} \right\rfloor, 0 \right] - \max \left[\left\lfloor \frac{j+1-k}{2} \right\rfloor, 0 \right],$$

wobei berücksichtigt werden muss, dass kein Prozess Ordnungen wegnimmt. Dies wird mit der Maximumsberechnung gewährleistet, da minimal 0 von O_{Ziel} abgezogen werden kann.

Diese so bestimmte obere Schranke für die maximalen Ordnungen kann durch die verschärfte a-posteriori-Regel noch weiter verbessert werden. Wie schon erwähnt nutzt diese Regel spezifische Eigenschaften des zu untersuchenden Modells.

Das Spinleitermodell ist ein Modell in dem Anregungen paarweise benachbart mit $O(x)$ erzeugt und mit $O(x)$ um einen Platz verschoben werden können. Diese Eigenschaft wird in der verschärften Regel ausgenutzt, um die Abschätzung zu verbessern.

Sie betrachtet nicht nur die Anzahl der Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren, sondern auch noch zusammenhängende Cluster dieser. Es wird also noch die Lage dieser Operatoren berücksichtigt. Ein Cluster von zum Beispiel Vernichtungsoperatoren sind eine Gruppe von Vernichtungsoperatoren, die auf benachbarten Plätzen wirken. Schematisch sind solche Cluster für sieben Vernichtungsoperatoren in Abbildung 4.3.3 dargestellt. Die direkt benachbarten Punkte bilden solch ein Cluster.

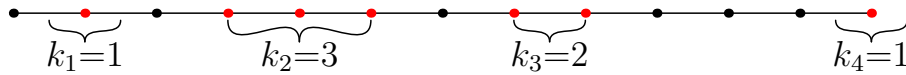


Abbildung 4.3.3: Beispiel zur verschärften Auswahlregel. Die roten Punkte stellen Vernichtungsoperatoren dar. Die Anzahl dieser Vernichtungsoperatoren ist $n(V) = 7$. Direkt benachbarte Punkte bilden ein Cluster. Die Cluster sind mit den geschweiften Klammern gekennzeichnet. Die k_i , mit denen man $k(V)$ berechnen kann, sind angegeben.

Anhand dieses Beispiels wird die Regel erläutert. Auch hier wird wieder mit der Grundzustandsenergie angefangen. Danach wird diese Regel noch für den Einteilchenraum verallgemeinert.

Ein Term $H_{j,n}$ vernichtet n Triplonen an den Orten

$$V = \{v_1 < v_2 < \dots < v_n\} \quad (4.3.26)$$

und erzeugt j Triplonen an den Orten

$$E = \{e_1 < e_2 < \dots < e_j\}. \quad (4.3.27)$$

Definiert wird eine Funktion k der Form

$$k_0(V) = \sum_{i=1}^c \left\lfloor \frac{k_i + 1}{2} \right\rfloor, \quad (4.3.28)$$

wobei die Menge V in c zusammenhängende Cluster zerfällt. Diese Funktion lässt sich analog auch für die Erzeugungsoperatoren definieren. Der Index 0 gibt an, für welchen Teilchenraum diese Abschätzung gilt. Der i -te Cluster erhält k_i Punkte, so dass

$$n = \sum_{i=1}^c k_i \quad (4.3.29)$$

gilt. Das Beispiel zeigt sieben Vernichtungsoperatoren, also $n = 7$. Die k_i sind in Abbildung 4.3.3 abgebildet. Nun erhält man nach Gleichung 4.3.28

$$k_0(V) = 1 + 2 + 1 + 1 = 5. \quad (4.3.30)$$

Aufgrund der Einschränkung, dass Anregungen paarweise benachbart mit $O(x)$ erzeugt bzw. vernichtet werden können, benötigt man die Ordnung $x^{k(V)}$, um den Cluster auf bzw. abzubauen.

Damit verschärft sich die Abschätzung aus Gleichung 4.3.23 zu

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq O_{\text{Ziel}} - k_0(E) - k_0(V), \quad (4.3.31)$$

wobei E bzw. V die Menge der Plätze sind, wo Anregungen erzeugt bzw. vernichtet werden.

Diese Abschätzung lässt sich auch für die Einteilchengrößen formulieren. Da bei Einteilchengrößen ein Gitterplatz nicht abgebaut werden muss, kann ein k_i um Eins kleiner sein. Dabei muss man aber zwischen geraden und ungeraden k_i unterscheiden. Es gilt

$$k_1 = \begin{cases} \sum_{i=1}^j \left\lfloor \frac{k_i+1}{2} \right\rfloor - 1, & \text{wenn mindestens ein } k_i \text{ ungerade ist,} \\ \sum_{i=1}^j \left\lfloor \frac{k_i+1}{2} \right\rfloor, & \text{wenn alle } k_i \text{ gerade sind.} \end{cases} \quad (4.3.32)$$

Damit erhält man

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq O_{\text{Ziel}} - k_1(E) - k_1(V) \quad (4.3.33)$$

als Abschätzung. Es ist natürlich möglich, die Funktion $k_\nu(V)$ bzw. $k_\nu(E)$ für jeden beliebigen Teilchenraum zu bestimmen, damit verallgemeinert sich die $O_{\max}$ -Abschätzung zu

$$O_{\max}(H_{j,n}) \leq O_{\text{Ziel}} - k_\nu(E) - k_\nu(V). \quad (4.3.34)$$

Dabei ist $\nu \in \{0, 1, 2, \dots\}$ je nach betrachteter ν -Teilchen-Größe.

Diese Abschätzungen werden alle nach einer Kommutatorberechnung mit den neu erzeugten Termen durchgeführt, weshalb diese Überlegung a posteriori-Regeln liefert.

4.3.2.2 A-priori Regeln

Möchte man aber *vor* einer Kommutatorberechnung abschätzen, ob dieser überhaupt einen einzigen relevanten Beitrag liefert und daher berechnet werden muss, so kann man die a-priori-Regel nutzen. Diese Regel schätzt ab, ob ein Beitrag im Differentialgleichungssystem überhaupt beiträgt. Auch hier existieren wieder eine einfache und eine verschärfte Regel, welche im Folgenden erläutert werden.

Bei beiden Regeln ist der Startpunkt ein Kommutator der Form

$$[T, D] = TD - DT, \quad (4.3.35)$$

mit

$$T = t_{n_1}^\dagger t_{n_2}^\dagger \dots t_{n_j}^\dagger t_{m_1} t_{m_2} \dots t_{m_i} \quad (4.3.36)$$

$$D = t_{p_1}^\dagger t_{p_2}^\dagger \dots t_{p_k}^\dagger t_{q_1} t_{q_2} \dots t_{q_l}. \quad (4.3.37)$$

Dabei hat T bzw. D j bzw. k Erzeuger und i bzw. l Vernichter. Um den Kommutator zu berechnen, reicht es, den Ausdruck $TD - DT$ normal zu ordnen. Ziel ist es abzuschätzen, welche maximale Ordnung die resultierenden Terme des normalgeordneten Terms $TD - DT$ besitzen. Dabei wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit das Vorgehen für den Term TD erläutert. Analog muss auch der Term DT behandelt werden.

Die Idee hinter dieser Abschätzung ist sich zu überlegen, wie viele Erzeuger und Vernichter sich gegenseitig wegheben. Aus den übrig gebliebenen Anzahlen der beiden Operatoren kann man wie bei den a-posteriori-Regel die Ordnung abschätzen.

Für die einfache a-priori Regel wird anhand der Anzahl der Vernichter- und Erzeugungsoperatoren, die TD mindestens besitzen kann, die maximale Ordnung abgeschätzt. Dabei muss man zwei unterschiedliche Fälle betrachten:

1. $i \geq k$:

In diesem Fall besitzt jeder mögliche Term, der aus einer Normalordnung von TD resultiert, mindestens j Erzeuger und $l + i - k$ Vernichter. Daraus folgt, analog zu den Überlegungen aus der einfachen a-posteriori Regel,

$$O_{\max}(TD) \leq \quad (4.3.38)$$

$$O_{\text{Ziel}} - \max \left[\left\lfloor \frac{j + 1 - \nu}{2} \right\rfloor, 0 \right] - \max \left[\left\lfloor \frac{l + i - k + 1 - \nu}{2} \right\rfloor, 0 \right]$$

als Abschätzung.

2. $k > i$:

In diesem Fall besitzt jeder mögliche Term, der aus einer Normalordnung von TD resultiert, mindestens $j+k-i$ Erzeuger und l Vernichter. Daraus folgt

$$O_{\max}(TD) \leq \quad (4.3.39)$$

$$O_{\text{Ziel}} - \max \left[\left\lfloor \frac{j+k-i+1-\nu}{2} \right\rfloor, 0 \right] - \max \left[\left\lfloor \frac{l+1-\nu}{2} \right\rfloor, 0 \right]$$

als Abschätzung.

Das Maximum von $O_{\max}(TD)$ und $O_{\max}(DT)$ bestimmt die obere Schranke für die maximalen Ordnungen von $[T, D]$.

Diese Regel lässt sich ebenfalls verschärfen. Jedoch sollte man in der praktischen Umsetzung erst die einfache Regel und dann für genauere Prüfungen die verschärfte Regel nutzen, da die verschärfte Regel aufwendiger zu prüfen ist.

Die verschärfte Regel nutzt die Eigenschaften, die die verschärfte a-posteriori Regel auch nutzte. Desweiteren wird noch verwendet, dass die Quasiteilchen Hardcore-Bosonen sind.

Auch hier wird in der Erläuterung nur die maximale Ordnung des normalgeordneten Terms TD betrachtet. Für die Abschätzung der maximale Ordnung von DT geht man analog vor. Die Verschärfung wird wie bei der verschärften a-posteriori Regel mit Hilfe der Cluster von Erzeugern bzw. Vernichter erreicht. Dazu werden den Ausdrücken T und D zuvor die Cluster von Erzeugungs (ec)- und Vernichtungsoperatoren (vc) der Form

$$ec(T) = \{n_1, \dots, n_j\} \quad (4.3.40)$$

$$ec(D) = \{p_1, \dots, p_k\} \quad (4.3.41)$$

$$vc(T) = \{m_1, \dots, m_i\} \quad (4.3.42)$$

$$vc(D) = \{q_1, \dots, q_l\} \quad (4.3.43)$$

zugeordnet.

Gilt nun für die Schnittmengen

$$ec(T) \cap vc(D) = \emptyset \quad \text{und} \quad ec(D) \cap vc(T) = \emptyset \quad (4.3.44)$$

so vertauscht der Kommutator und es gilt

$$[T, D] = 0. \quad (4.3.45)$$

Gelten die Gleichungen 4.3.44 nicht, so erhält man in der Schnittmenge

$$S = vc(T) \cap ec(D) \quad (4.3.46)$$

die Plätze der Erzeuger und Vernichter des Terms TD , die sich gegenseitig wegheben.

Mit dieser Schnittmenge kann man die minimalen Mengen von Gitterplätzen bestimmen, auf denen Erzeuger bzw. Vernichter wirken. Man erhält

$$E = ec(T) \cup (ec(D) \setminus S) \quad (4.3.47)$$

und

$$V = vc(D) \cup (vc(T) \setminus S) \quad (4.3.48)$$

als minimale Menge von Gitterplätzen auf denen Erzeuger (Gleichung 4.3.47) bzw. Vernichter (Gleichung 4.3.48) wirken.

Dabei ist zu beachten, dass $ec(T)$ bzw. $vc(D)$ und $ec(D) \setminus S$ bzw. $vc(T) \setminus S$ disjunkt sind, da sonst $TD = 0$ gelten würde, wegen der Hardcore-Eigenschaft. Damit lässt sich analog zur Gleichung 4.3.34 die maximale Ordnung durch

$$O_{\max}(TD) \leq O_{\text{Ziel}} - k_{\nu}(E) - k_{\nu}(V) \quad (4.3.49)$$

abschätzen. Die Funktionen k_{ν} berechnen sich je nach Teilchenraum, wie im Abschnitt der a-posteriori Regel erklärt ist. Als abgeschätzte maximale Ordnung des Terms $TD - DT$ wird wieder das Maximum aus $O_{\max}(TD)$ und

$O_{\max}(DT)$ verwendet.

Die hier erwähnten Auswahlregeln steigern die Effizienz der EP-CUT beim Aufstellen der Flussgleichung essentiell, wie man in Abbildung 4.3.2 erkennt. Die hier getroffenen Überlegungen lassen sich auch auf andere Modelle verallgemeinern, sodass auch dort die EP-CUT effektiv eingesetzt werden kann. Dies macht die EP-CUT sehr flexibel.

Prinzipiell ist es auch möglich, noch schärfere Auswahlregeln für die Spinleiter zu bestimmen, als hier angegeben worden sind. Man könnte zum Beispiel zusätzlich noch die Polarisierung der Spins berücksichtigen. Solche Überlegungen sind allerdings sehr stark modellspezifisch und wurden deshalb nicht berücksichtigt. Desweiteren muss man bei diesen Regeln immer den Nutzen mit dem zusätzlichen Aufwand vergleichen. Auch die Auswahlregeln benötigen Rechenzeit und Rechenspeicher. Je detailreicher diese werden, desto aufwendiger wird die Implementierung der Auswahlregeln.

4.4 Direkte Auswertung

Ist das Differentialgleichungssystem durch die Optimierungen gemäß der Zielordnung für die festgelegte Größe reduziert worden, so lässt sich das neue Differentialgleichungssystem einerseits perturbativ lösen. Andererseits kann man das Differentialgleichungssystem auch direkt für ein gegebenes x auswerten. Diese Auswertungsart wird *direkte Auswertung* genannt und ist ähnlich zur S-CUT Auswertung.

Bei der direkten Auswertung wird x vor der Berechnung auf einen festen Wert eingestellt und es werden mit Hilfe des minimalen Differentialgleichungssystems aus Gleichung 4.1.19 die Koeffizienten h_i berechnet. Dies entspricht in gewissen Sinne einer Extrapolation der perturbativen Auswertung.

Die Startwerte der Koeffizienten für die Integration ergeben sich aus

$$h_i(l=0) = \sum_{j=n_i}^{O_{\text{Ziel}}} f_i^{(j)}(l=0)x^j. \quad (4.4.1)$$

Löst man das Differentialgleichungssystem mit diesen Startwerten, so erhält man einen effektiven Hamiltonoperator der Form

$$H_{\text{eff}} = \sum_i h_i(\infty) \hat{H}_i. \quad (4.4.2)$$

Es ist zu beachten, dass für jeden x -Wert das Differentialgleichungssystem neu berechnet werden muss. Das System wird in der Praxis numerisch mit Hilfe eines Runge-Kutta-Verfahrens gelöst. Deshalb ist es nur möglich, bis zu einem endlichen l zu integrieren. Aussagen über die Konvergenz lassen sich mit Hilfe der ROD aus Kapitel 2.5 treffen. Anders als bei der perturbativen Auswertung, muss dieses System nicht für jeden x -Wert konvergieren. Dies liegt daran, dass bei gewissen x -Werten die Teilchenräume überlappen könnten und dadurch die CUT diese Räume nicht mehr ordnen kann. Dadurch fängt das Differentialgleichungssystem an zu divergieren.

Essentiell bei dieser Auswertung ist die vorherige Reduzierung des Differentialgleichungssystems. Wir haben beobachtet, dass ohne die vorherige Reduzierung das in dieser Arbeit untersuchte System nicht mit steigender Ordnung gegen einen bestimmten Wert konvergiert. Die Berechnung ist also ohne Reduzierung nicht stabil.

Desweiteren ist diese Auswertung keine S-CUT, obwohl sie dazu ähnlich ist. Sie besitzt kein selbstähnliches Trunkierungsschema. Stattdessen trunkiert man das Differentialgleichungssystem, da die O_{max} -Iteration das Differentialgleichungssystem reduziert.

Vorteil dieser Auswertungsart ist es, dass im Falle der Spinleiter die Berechnung auch für große x -Werte sehr robust ist, siehe Kapitel 5. Ein weiterer Vorteil im Vergleich zur S-CUT ist, dass das Trunkierungsschema in diesem Fall mit der Ordnung O_{Ziel} nur einen Kontrollparameter bei der Trunkierung besitzt.

Die hier vorgestellte EP-CUT ist eine CUT-Methode, die zwei Auswertungsmöglichkeiten (perturbativ und direkt) mit nur einem Differentialgleichungssystem vereinigt. Dies macht die Methode sehr effizient. Desweiteren kann man mit diesen beiden Auswertung testen, ob die Ergebnisse konsistent zueinander sind. Für kleine x -Werte sollten sowohl die perturbative als auch die direkte Auswertung nahezu dieselben Ergebnisse liefern.

5 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Resultate der EP-CUT-Methode an den vorgestellten Modellen erläutert. Damit soll die Leistungsfähigkeit dieser Methode gezeigt werden.

5.1 Spinleiter

In diesem Kapitel werden die Resultate der EP-CUT für die Spinleiter vorgestellt und diskutiert. Dabei werden die Grundzustandsenergie (Kap. 5.1.1) und die Dispersion (Kap. 5.1.2) bestimmt. Mit diesen Größen lässt sich die Leistungsfähigkeit der EP-CUT für ein Modell mit äquidistanten Energiespektrum zeigen.

Zusätzlich wird in Kapitel 5.1.3 die direkte Auswertung der EP-CUT für die Beschreibung der Dispersion des Materials DIMPY erfolgreich eingesetzt.

5.1.1 Grundzustand

Das Differentialgleichungssystem für die Grundzustandsenergie wurde mit dem 0n-Generator berechnet. Mit Hilfe der Optimierungen ist die 17. Ordnung erreicht worden. Aufgrund der Generatorwahl ist die Grundzustandsenergie pro Sprosse einfach durch den Koeffizienten $h_0(l_{max})$ gegeben.

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der perturbativen- und direkten Auswertung vorgestellt. Um die Funktionalität dieser Methode zu zeigen, werden die Ergebnisse mit Ergebnissen anderer Methoden verglichen.

Als erstes werden die Resultate der perturbativen Auswertung diskutiert. Mit dieser erhält man für die Grundzustandsenergie eine Störungsreihe in x . Die Koeffizienten dieser Reihe sind in Tabelle 5.1.1 aufgelistet. Diese Werte sind als Gleitkommazahlen angegeben. Desweiteren sind in dieser Tabelle die Koeffizienten der P-CUT [23] als exakte Brüche angegeben. Die Koeffizienten stimmen sehr gut überein. Abweichungen von den exakten Brüchen sind erst in der siebten Nachkommastelle vorhanden. Die Abweichungen sind auf Einstellungen des Runge-Kutta-Algorithmus, hier wurde ein $l_{max} = 30$ verwendet, und auf numerische Ungenauigkeit zurückzuführen. Mit einen größeren

Ordnung	EP-CUT	P-CUT	Ordnung	EP-CUT	P-CUT
0	-0.75	$-\frac{3}{4}$	9	-0.236884123	$-\frac{248391}{1048576}$
1	0	0	10	0.160468576	$\frac{336527}{2097152}$
2	-0.37500000	$-\frac{3}{8}$	11	0.585320596	$\frac{117840599}{201326592}$
3	-0.187499998	$-\frac{3}{16}$	12	0.434940501	$\frac{175130171}{402653184}$
4	0.023437497	$\frac{3}{128}$	13	-0.502659133	$-\frac{58290422737}{115964116992}$
5	0.175781251	$\frac{45}{256}$	14	-1.415935596	$-\frac{246296576249}{173946175488}$
6	0.155273440	$\frac{159}{1024}$	15	-0.844144139	—
7	-0.053649901	$-\frac{879}{16384}$	16	1.609701223	—
8	-0.276306155	$-\frac{4527}{16384}$	17	3.673813734	—

Tabelle 5.1.1: Vergleich der Koeffizienten des Grundzustands zwischen EP-CUT und P-CUT [23].

$l_{\max}$ hätte man vielleicht die Genauigkeit ein wenig erhöhen können. Desweiteren stimmen die Koeffizienten gut mit denen von Referenz [22] überein. Auch hier sind die ersten Abweichungen erst in der siebten Nachkommastelle zu beobachten. Da dieselben Ergebnisse wie bei der P-CUT und anderen perturbativen Methoden erzielt worden sind, zeigt dies, dass die perturbative Auswertung der EP-CUT funktioniert.

Die Ergebnisse der trunkierten Reihe sind in Abbildung 5.1.1 dargestellt.

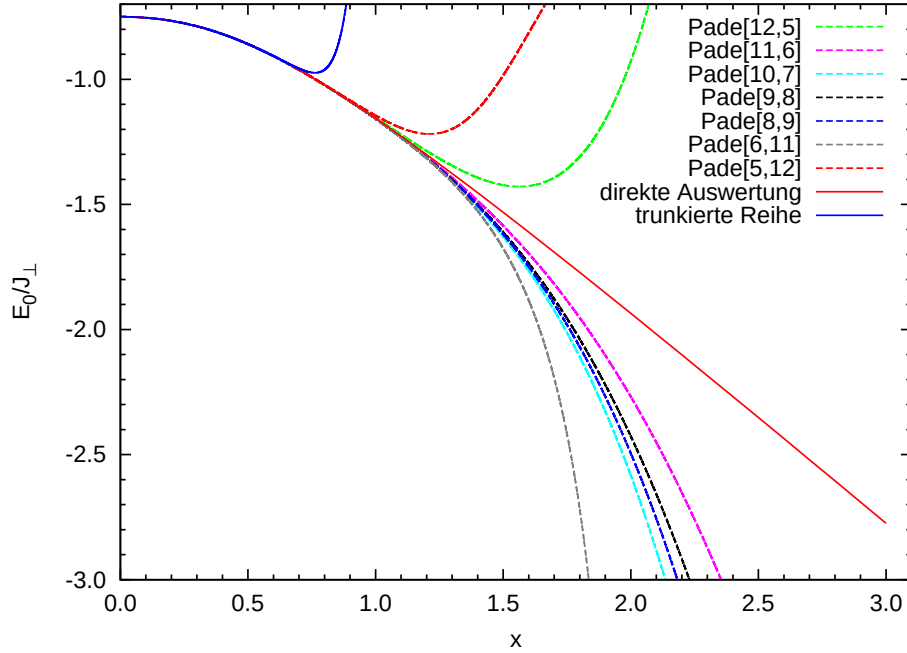


Abbildung 5.1.1: Ergebnisse der Berechnung des Grundzustands der Spinleiter mit Hilfe der perturbativen und direkten Auswertung in 17. Ordnung. Dabei sind die trunkierte Reihe sowie Padé-Extrapolationen abgebildet. Die rote Linie gibt die Ergebnisse der direkten Auswertung an.

Die trunkierte Reihe ist nur bis zu einem Wert von $x \approx 0.7$ zuverlässig. Um Aussagen für größere x -Werte zu tätigen, muss diese Reihe extrapoliert werden. Die hier gewählte Extrapolation ist die Padé-Extrapolation. Sie wird in Kapitel 7.1.1 erläutert. Die berechneten Padé-Extrapolationen sind auch in Abbildung 5.1.1 dargestellt. Die extrapolierten Reihen sind bis $x \approx 1.2$ zuverlässig.

Desweiteren ist in dieser Abbildung die Energie der direkten Auswertung zu sehen. Bei der direkten Auswertung erhält man anstatt einer Reihe in x eine Gleitkommazahl für jeden x -Wert. Es ist zu erwarten, dass mit steigender Ordnung das Ergebnis dieser Auswertung immer genauer wird. Also müsste mit steigender Ordnung die direkte Auswertung gegen einen Zahlenwert konvergieren. Dieses soll zunächst getestet werden. Dazu werden die Resultate der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen verglichen, siehe

Abbildung 5.1.2.

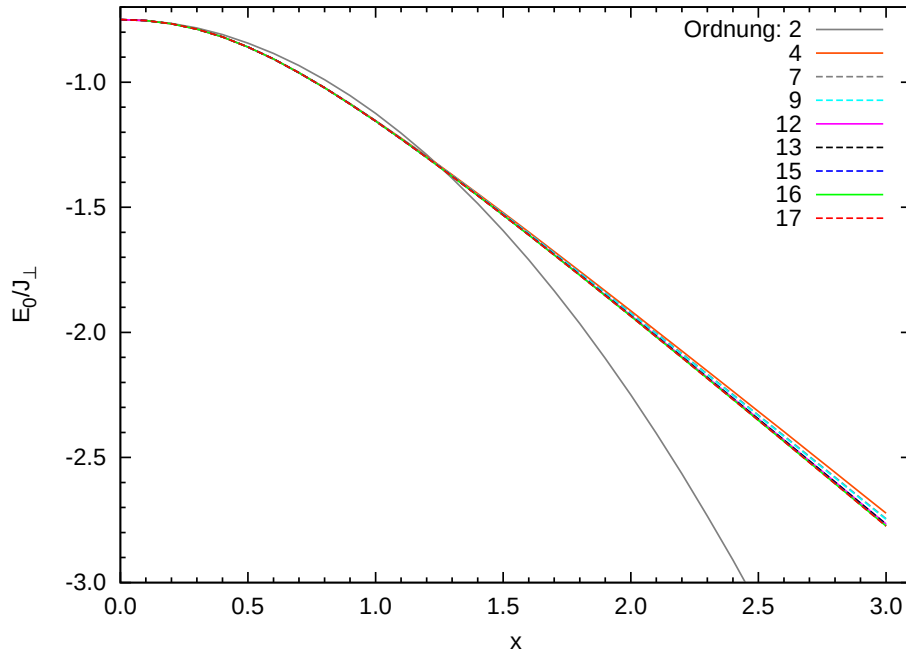


Abbildung 5.1.2: Ergebnisse der Berechnung des Grundzustands der Spinleiter mit Hilfe der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen. Gerade Ordnungen sind mit durchgezogener und ungerade mit gestrichelter Linie gezeichnet. Die Ergebnisse konvergieren sehr gut mit steigender Ordnung.

Wie man erkennt, konvergiert die Grundzustandsenergie mit steigender Ordnung. Der Unterschied zwischen 12. und 17. Ordnung ist sehr gering. Die Abweichung liegt bei jedem berechneten x -Wert unter 1%. Es lässt sich aber auch erkennen, dass je höher die x -Kopplung ist, desto höher ist die Ordnung, in der das Ergebnis auskonvergiert ist.

Dies liegt daran, dass bei höheren x -Werten eine höhere Reichweite der Wechselwirkungsprozesse möglich ist, die die Grundzustandsenergie noch beeinflussen können. Diese Wechselwirkungsprozesse werden aber erst mit Termen höherer Ordnungen beschrieben, so dass man für diese Einflüsse ein System höherer Ordnung benötigt.

Da die Konvergenz dieser Methode gezeigt ist, wird nun die Grundzustandsenergie in höchster Ordnung betrachtet. Diese Ordnung ist in Abbildung

5.1.1 zu sehen. Die Ergebnisse stimmen für kleine x -Werte exzellent mit denen der perturbativen Auswertung überein. Sie liefert aber auch qualitativ gute Ergebnisse für große x -Werte. In diesem Fall ist die Energie bis $x = 3$ berechnet worden. Die ROD für einige ausgewählte x -Werte ist in Abbildung 5.1.3 zu sehen. Wie diese zeigt, konvergieren die Rechnungen für die einzelnen x -Werte sehr gut, nämlich exponentiell. Bemerkenswerterweise wird die Konvergenz sogar schneller für größere x -Werte. Das liegt vermutlich daran, dass die mittlere Anregungsenergie für große x -Werte linear mit x steigt. Vergleicht man die perturbative mit der direkten Auswertung, so erkennt man in der direkten Auswertung eine sehr gute Extrapolation der perturbativen Resultate. Die Kurve der direkten Auswertungen, siehe Abbildung 5.1.1, läuft stabil zwischen den auffächernden extrapolierten Reihenergebnissen.

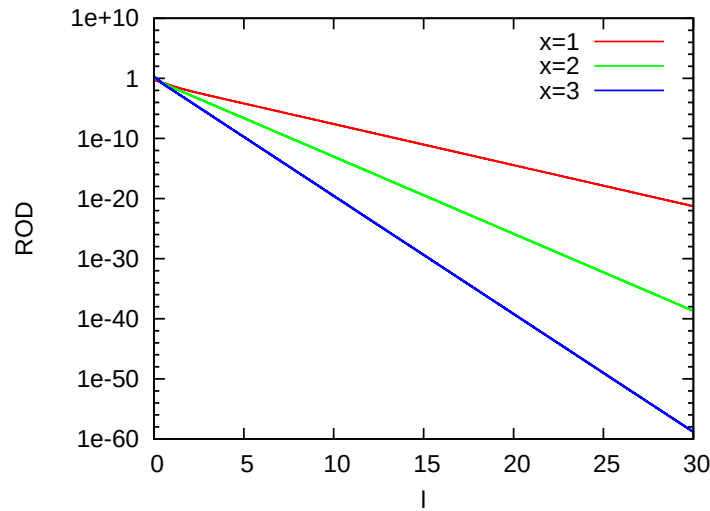


Abbildung 5.1.3: Die berechnete ROD, nach Gleichung 2.5.1, für die x -Werte 0.5, 1.0, 1.5, 2, 2.5, 3.

Zum Abschluss dieses Kapitels werden die bisherigen Resultate mit denen anderer Methoden verglichen. Wie schon erwähnt gleichen sich die Ergebnisse der perturbativen Auswertung mit denen der P-CUT. Damit ist gezeigt, dass die perturbative Auswertung funktioniert.

Um weiterhin zu zeigen, dass die direkte Auswertung auch quantitativ gute

Resultate für große x liefert, wird sie mit anderen Methoden verglichen. Dabei handelt es sich um eine S-CUT-Rechnung [28] und eine DMRG-Rechnung [29, 30, 31], siehe Abbildung 5.1.4.

Bei den DMRG-Daten [29] handelt es sich um die Grundzustandsenergie bei gegebenen x der Spinleiter für verschiedene Anzahlen an Sprossen ($L = 40, 60, \dots, 160$) mit offenen Randbedingungen. Um diese Daten mit denen der EP-CUT zu vergleichen, müssen zunächst die Energien für eine unendliche Spinleiter bestimmt werden. Dazu wurden die Daten für ein festes x mit der Funktion

$$f(L) = f(\infty) + c_0 \frac{e^{-L/L_0}}{L^p} \quad (5.1.1)$$

extrapoliert [19]. Hierbei gibt L die Anzahl der Sprossen der Spinleiter an und p , L_0 und c_0 sind Konstanten. Damit erhält man die Energie $f(\infty)$ für die unendlich lange Spinleiter und kann diese Ergebnisse mit denen der EP-CUT vergleichen.

Die S-CUT-Rechnung [28] wurde mit dem 0n-Generator und einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4) durchgeführt.

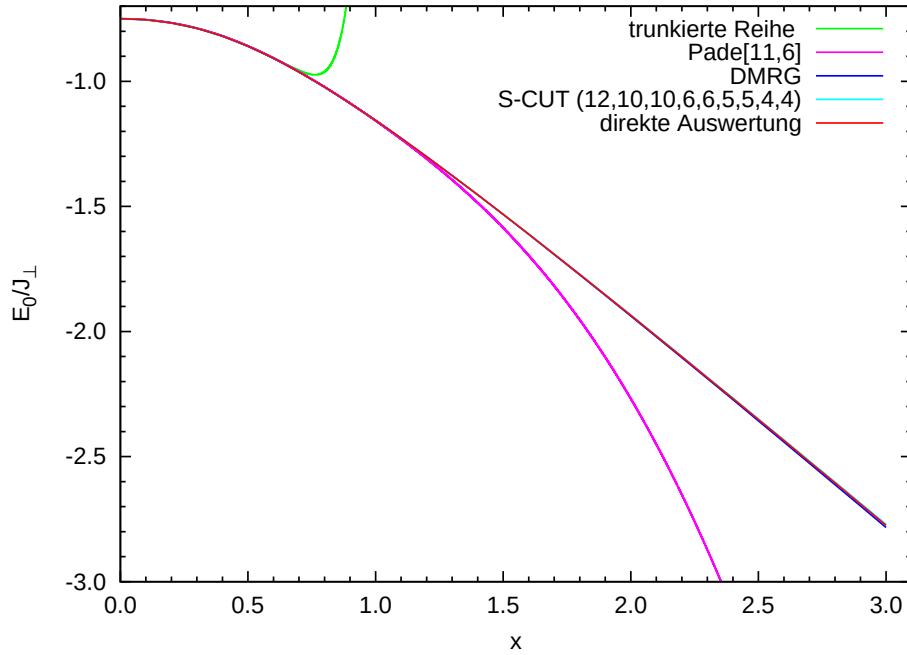


Abbildung 5.1.4: Vergleich der Grundzustandsergebnisse verschiedener Methoden. Die direkte und perturbative Auswertung der EP-CUT in 17. Ordnung, die beste Padé-Extrapolation der perturbativen Auswertung, eine S-CUT-Berechnung [28] sowie eine DMRG-Berechnung [29].

Wie die Abbildung 5.1.4 zeigt, liegen die Resultate der unterschiedlichen Methoden sehr gut beieinander. Um die Abweichungen zwischen diesen einzelnen Resultaten zu verdeutlichen, wird ein Referenzergebnis gewählt und die Abweichung der anderen Resultate von diesem Referenzergebnis bestimmt. Als Referenzresultat soll das DMRG-Ergebnis dienen. Die Abweichungen sind in Abbildung 5.1.5 dargestellt.

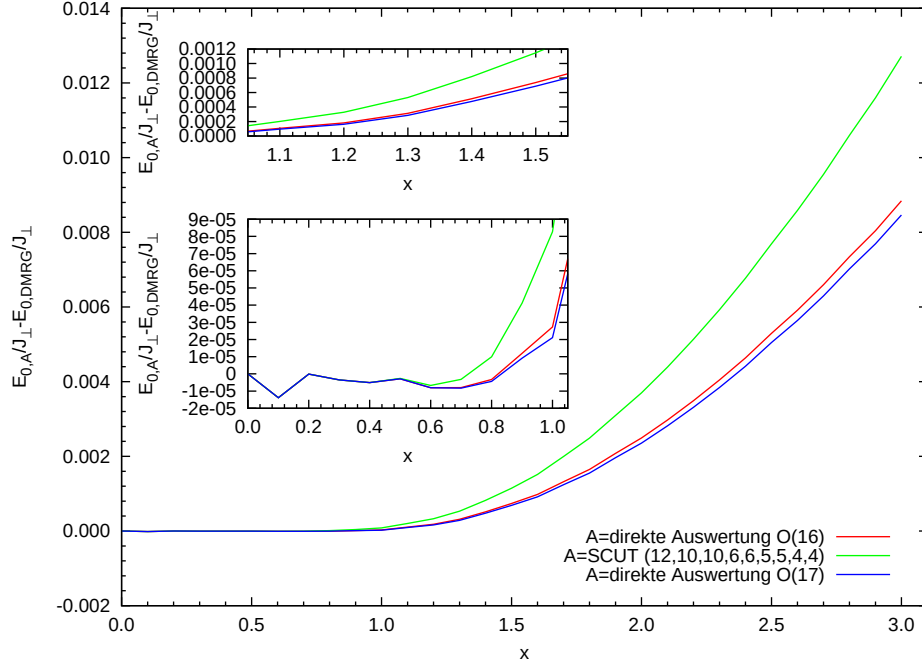


Abbildung 5.1.5: Abweichungen der verschiedenen Methoden. Als Referenzwert ist das Ergebnis der DMRG-Rechnung [29] $E_{0,DMRG}/J_{\perp}$ gewählt. Diese Energie wird von den anderen Energien $E_{0,A}/J_{\perp}$ abgezogen, Für welche Methode das A steht, ist in der Legende angegeben.

Wie man an dieser Abbildung erkennt, stimmen die Ergebnisse für $x < 1$ sehr gut überein. Für größere Wert weichen diese immer mehr ab. Allgemein kann man schließen, dass die direkte Auswertung auch bei großen x -Werten sehr gute Ergebnisse liefert.

5.1.2 Dispersion

Das Differentialgleichungssystem wurde mit dem 0n:1n-Generator aufgestellt. Es wurde die 15. Ordnung erreicht.

Die Einteilchen-Dipersion $\omega(k)$ kann man aus dem (1,1)-Block ($H_{1,1}$) des effektiven Hamiltonoperators bestimmen. Dazu wird dieser Block mit Hilfe der Fouriertransformation diagonalisiert. Die Fouriertransformation eines

Zustands ist durch

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} |j\rangle \quad (5.1.2)$$

gegeben, wobei j die Sprossen zählt und N die Gesamtanzahl aller Sprossen ist. Berechnet man die Wirkung von $H_{1,1}$ auf den Zustand $|k\rangle$ folgt

$$H_{1,1} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,d=-O_{\text{Ziel}}}^{O_{\text{Ziel}}} e^{-ikj} t_d |j+d\rangle \quad (5.1.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j,d=-O_{\text{Ziel}}}^{O_{\text{Ziel}}} e^{-ik(j-d)} t_d |j\rangle \quad (5.1.4)$$

$$= \sum_{d=-O_{\text{Ziel}}}^{O_{\text{Ziel}}} e^{ikd} t_d \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} |j\rangle}_{|k\rangle} . \quad (5.1.5)$$

Dabei ist t_d das Einteilchen-Hüpfmatrixelement mit Reichweite d aus dem $H_{1,1}$ -Block. Die maximale Reichweite ist durch die Zielordnung gegeben. Für $d = 0$ erhält man die lokale Energie. Da dieser Hamiltonoperator spiegelsymmetrisch ist, gilt $t_{-d} = t_d$. Damit lässt sich die Dispersion als

$$\omega(k, x) = \langle k | H_{1,1} | k \rangle = t_0 + \sum_{d=1}^{O_{\text{Ziel}}} 2t_d \cos(dk) \quad (5.1.6)$$

schreiben. Eine analoge Herleitung der Dispersion findet sich in Referenz [23]. Im Folgenden werden die Resultate der beiden Auswertungsmethoden vorgestellt und diskutiert.

Bei der perturbativen Auswertung sind die t_d wieder durch eine Reihe in x beschrieben. Die Koeffizienten der 15. Ordnung befinden sich im Anhang 7.2. Sie stimmen mit denen anderer perturbativen Methoden [21] sehr gut überein. Die Abweichungen sind erst in achter Nachkommastelle zu erkennen.

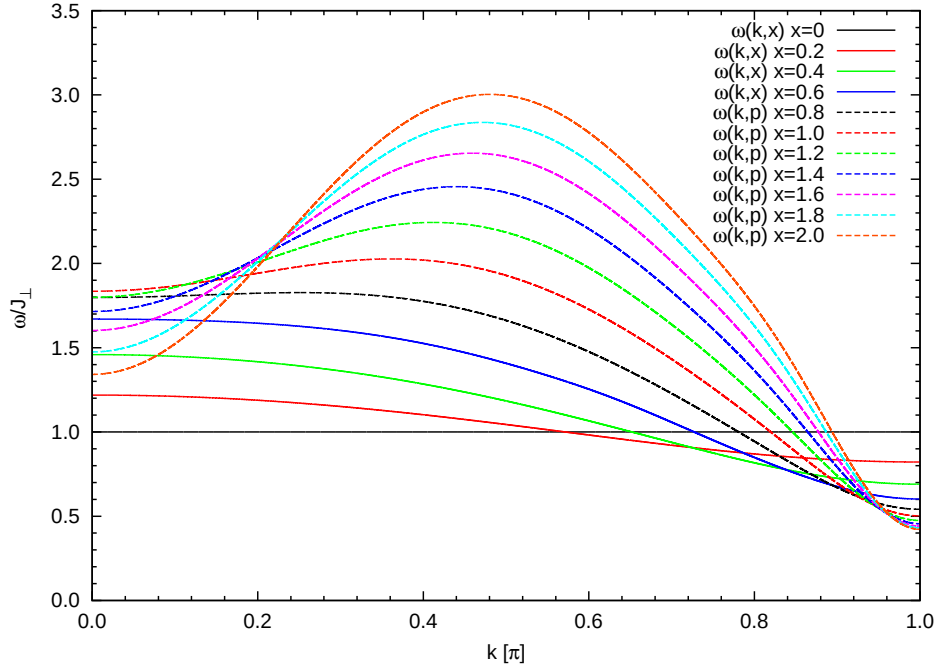


Abbildung 5.1.6: Die Dispersion der perturbativen Auswertung. Die ersten vier Kurven sind die trunkierten Reihen. Ab $x = 0.8$ sind die trunkierten Reihen im Hilfsparameter p gezeigt.

Die Dispersion $\omega(x, k)$ für verschiedene x -Werte ist in Abbildung 5.1.6 zu sehen. Da die trunkierte Reihe für $\omega(x, k)$ nur bis $x \approx 0.6$ zuverlässig ist, muss diese extrapoliert werden. Dazu wird die Methode des internen Parameters [32] verwendet, denn die Beschreibung einer physikalischer Größe als Funktion eines externen Parameter, in diesem Fall x , kann oft zu schlecht konvergierenden Reihen führen. Man kann aber die Größen häufig über interne Parameter ausdrücken, die eine glattere Abhängigkeit aufweisen, so dass die zugehörigen Reihen besser konvergieren.. Mit dieser Methode wird $\omega(x, k)$ also nicht über x sondern über einen internen Parameter p ausgedrückt. Als interner Parameter wird in diesem Fall die Energielücke Δ verwendet und man erhält

$$p = 1 - \frac{\Delta(x)}{(1+x)J_{\perp}}. \quad (5.1.7)$$

Die Energielücke ist das globale Minimum der Dispersion und liegt bei $k = \pi$. Die Energielücke der perturbativen Auswertung ist in Abbildung 5.1.7 zu sehen. Die Koeffizienten stimmen mit denen von Zheng et al. [22] wieder gut überein. Abweichungen sind erst ab der achten Nachkommastelle zu erkennen.

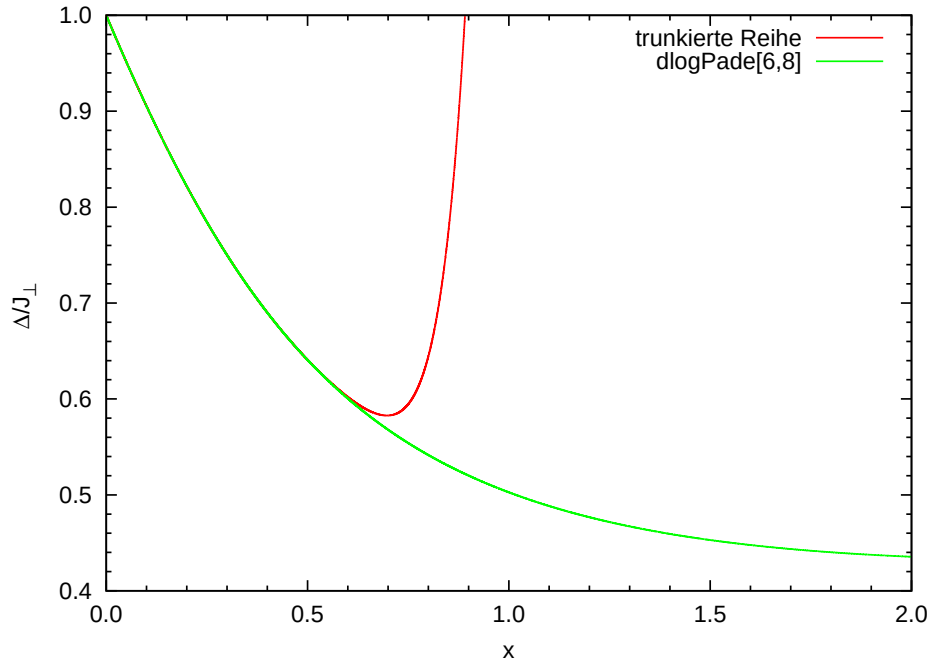


Abbildung 5.1.7: Die Energielücke der perturbativen Auswertung und nach dlogPadé extrapoliert.

Um nun die Dispersion über internen Parameter auszudrücken, wird wie folgt vorgegangen:

Als erstes wird die Energielücke extrapoliert, dazu wird eine dlogPadé-Extrapolation, siehe Kapitel 7.1.2, verwendet. Die Extrapolation der Energielücke ist auch in Abbildung 5.1.7 dargestellt. Sie ist so gewählt, dass sich für $x \rightarrow \infty$ ein konstante Energielücke ergibt [20]. Setzt man die extrapolierte Energielücke in Gleichung 5.1.7 ein, so erhält man den internen Parameter. Der interne Parameter muss nun folgende Eigenschaften erfüllen, damit man die Dispersion über ihn ausdrücken kann. Er muss monoton zwischen 0 und 1

mit x anwachsen und zusätzlich für kleine x -Werte proportional zu x sein. Sind diese Bedingungen erfüllt kann man die Dispersion zu

$$\omega(x, k) \rightarrow \omega(p, k) \quad (5.1.8)$$

umformen. Als Beispiel für die Methode sind für das Hüfelements t_1 die Reihen in x und p

$$t_1(x) = 0.5x - 0.12500000x^3 - 0.15625000x^4 \quad (5.1.9)$$

$$\begin{aligned} & - 0.10156250x^5 + 0.04687500x^6 + 0.16467285x^7 \\ & + 0.12779236x^8 - 0.08070850x^9 - 0.24961996x^{10} \\ & - 0.08650172x^{11} + 0.41219152x^{12} + 0.69643046x^{13} \\ & + 0.03314883x^{14} - 1.4674947x^{15} \end{aligned}$$

$$t_1(p) = 0.25000000p + 0.15625000p^2 + 0.10937500p^3 \quad (5.1.10)$$

$$\begin{aligned} & + 0.07958984p^4 + 0.05303955p^5 + 0.02309036p^6 \\ & - 0.01370811p^7 - 0.05918442p^8 + -0.11405495p^9 \\ & - 0.17801282p^{10} - 0.24965011p^{11} - 0.32631213p^{12} \\ & - 0.40391421p^{13} - 0.47671528p^{14} - 0.53701794p^{15} \end{aligned}$$

angegeben.

Die $\omega(p, k)$ sind ebenfalls in Abbildung 5.1.6 dargestellt. Diese sind nicht zusätzlich extrapoliert worden. Die Eigenschaften der in Abbildung 5.1.6 dargestellten Dispersionen werden im folgenden Abschnitt diskutiert.

Bei $x = 0$ ist das System lokal, was an der konstanten Dispersion $\omega^{(0,k)}/J_\perp = 1$ zu erkennen ist. Für größer werdende x -Werte ändert sich die Position des Maximums von $k = 0$ zu $k = \pi/2$. Dieses Verhalten ist auch in Referenz [33] festgestellt worden. Es lässt sich zum Einen damit erklären, dass das 3-Teilchen-Kontinuum bei $k = 0$ in die Nähe der Dispersion kommt und diese nach unten drückt. Auf diese Interpretation wird im späteren Verlauf nochmals Bezug genommen. Zum Anderen lässt sich dieses Verhalten damit erklären, dass für $x \rightarrow \infty$ die Spinleiter in 2 isolierte Spinketten übergeht. Spinketten besitzen eine Dispersion, die symmetrisch um $k = \pi/2$ und ener-

gielückenlos für $k = 0$ und $k = \pi$ ist [34]. Somit lässt sich der Abfall bei $k = 0$ als Vorbote der Spinkettenphysik erklären. Allgemein kann man sagen, dass diese Resultate denen in Kapitel 3.1 vorgestellten Resultaten anderer Methoden entsprechen.

Zunächst soll die direkte Auswertung diskutiert werden. Dabei wird als erstes wieder die Konvergenz der Methode mit steigender Ordnung untersucht. Dazu sind in Abbildung 5.1.8 die Dispersion für $x = 0.5$ und $x = 1$ für verschiedene Ordnungen abgebildet. Für $x = 0.5$ konvergieren die Resultate schon für sehr kleine Ordnungen. Der Unterschied von 6. zu 15. Ordnung ist kaum bemerkbar. Für $x = 1$ wird eine höhere Ordnung benötigt. Dies liegt daran, dass je größer x ist, desto größere Reichweiten sind beim Einteilchen-Hüpfen möglich. Da die Reichweite, die im System maximal berücksichtigt werden, durch die Ordnung bestimmt wird, muss für größere x eine höhere Ordnung verwendet werden.

Eine Möglichkeit abzuschätzen, ob eine bestimmte Ordnung die jeweilige x -Kopplung noch richtig beschreiben kann, ist mit Hilfe der Korrelationslänge ζ des Systems gegeben. Für die Korrelationslänge sollte

$$\zeta \leq \text{Ordnung} \quad (5.1.11)$$

gelten, damit die Dispersion noch richtig beschrieben werden kann. Die Korrelationslänge kann man mit Hilfe der berechneten Dispersion über

$$\zeta \approx \frac{v}{\Delta} \quad (5.1.12)$$

bestimmt werden. Hierbei gibt v die Spinwellengeschwindigkeit des Systems ohne Lücke an und lässt sich aus der Dispersion abschätzen. Dabei nehmen wir an, dass man diese mit Hilfe einer Sinusfunktion der Form $v|\sin(k)|$ beschreiben kann. Damit lässt sich v aus dem Maximum der Dispersion abschätzen und so die Korrelationslänge bestimmen. Die Korrelationslängen für verschiedene Ordnungen in Abhängigkeit von der x -Kopplung ist in Abbildung 5.1.9 abgebildet. Da für die 15. Ordnung die Korrelationslänge bis $x = 3$ kleiner als 15 ist, liefert diese Ordnung in diesen x -Wertebereich vernünftige Resultate.

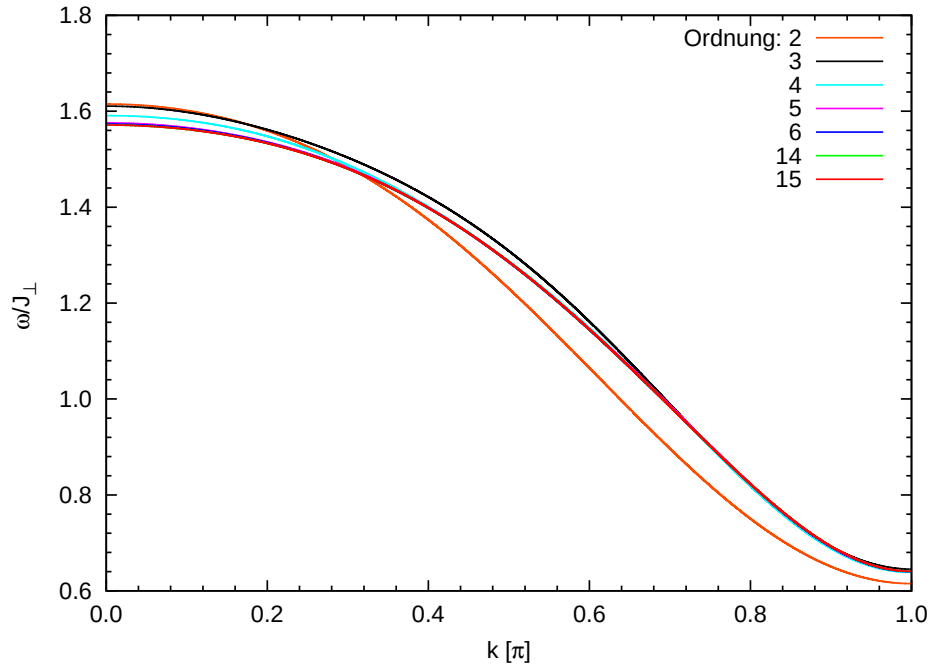
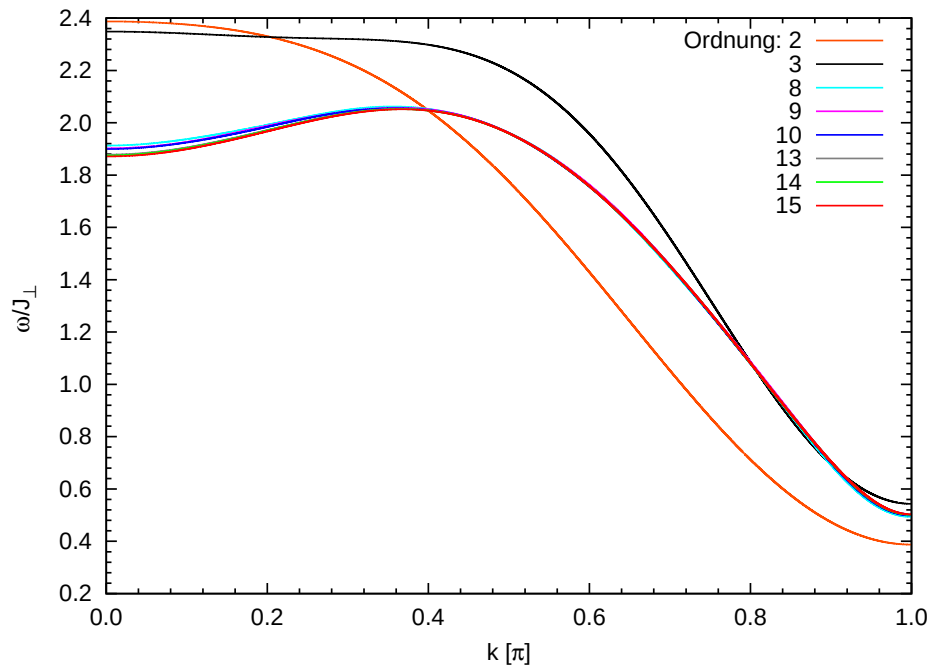
(a) $x=0.5$ (b) $x=1$

Abbildung 5.1.8: Die Dispersion für verschiedene Ordnungen mittels der direkten Auswertung für die Kopplungen $x = 0.5$ und $x = 1$.

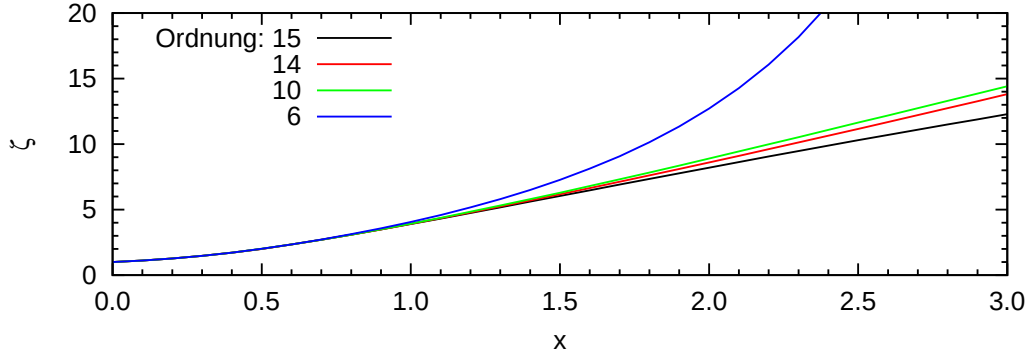


Abbildung 5.1.9: Abgeschätzte Korrelationslänge für verschiedene Ordnungen und x -Werte.

Die größten Abweichungen der Dispersionen, siehe Abbildung 5.1.8, verschiedener Ordnungen sind an den Stellen $k = 0$ und $k = \pi$ zu erkennen. Deswegen unterscheiden sich die Korrelationslängen bei großen x -Werten relativ stark, da die Energielücke, wie man an Abbildung 5.1.10 erkennen kann, zwischen den einzelnen Ordnungen in diesem x -Bereich sich relativ stark ändert. Deshalb wird die Energielücke ($k = \pi$) der direkten Auswertung genauer untersucht und mit der Energielücke aus einer DMRG-Rechnung [29] verglichen. Bei den DMRG-Daten wurde zu der Grundzustandsenergie E_0 , siehe Kapitel 5.1.1, auch noch die Energie der ersten Anregung E_1 berechnet. Aus diesen beiden Energien lässt sich durch $\Delta = E_1 - E_0$ die Energielücke für jeden x -Wert und jeder Länge L berechnen. Die Energielücke für jedes feste x muss wieder extrapoliert werden, um die Energielücke für die unendlich lange Spinleiter zu erhalten. Dabei wurden die Energielücke gegen $1/L$ und $1/L^2$ aufgetragen und mit den Funktionen, die in Abbildung 5.1.10 angegeben sind, extrapoliert.

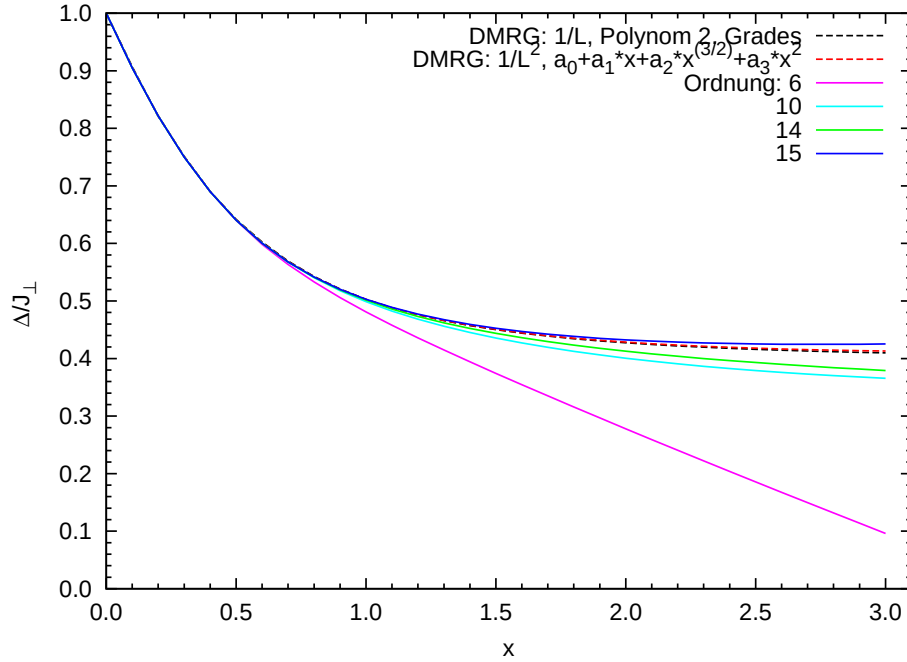


Abbildung 5.1.10: Die Energielücke der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen wird mit den extrapolierten DMRG-Daten [29] verglichen.

In Abbildung 5.1.10 ist die Energielücke der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen und x -Werte und zusätzlich die Energielücke aus einer DMRG-Rechnung [29] zu sehen. Für kleine x liegen alle Werte sehr gut beieinander. Jedoch werden die Abweichung zwischen den Ordnungen immer größer, je größer x wird. Vergleicht man dazu die 14. und 15. Ordnung der direkten Auswertung, so erkennt man, dass die Werte für die Energielücke ab $x \approx 1.3$ abweichen. Die relative Abweichung bei $x = 3$ liegt ungefähr bei 10%. Um zu zeigen, dass die direkte Auswertung auch für große x -Werte ein gutes Ergebnis in der höchsten Ordnung liefert, wird die Energielücke der 15. Ordnung mit dem aus der DMRG-Rechnung verglichen. Wie man erkennt, liegen die Ergebnisse auch bei großen x nah beieinander. Vergleicht man die Ergebnisse der 15. Ordnung mit den $1/L^2$ -extrapolierten DMRG-Resultaten, so erhält man eine relative Abweichung für $x = 1$ von 0.06%, $x = 2$ von 0.9% und $x = 3$ von 3.8%. Deshalb kann man sagen, dass die direkte Auswertung auch in diesem Bereich gute Ergebnisse liefert.

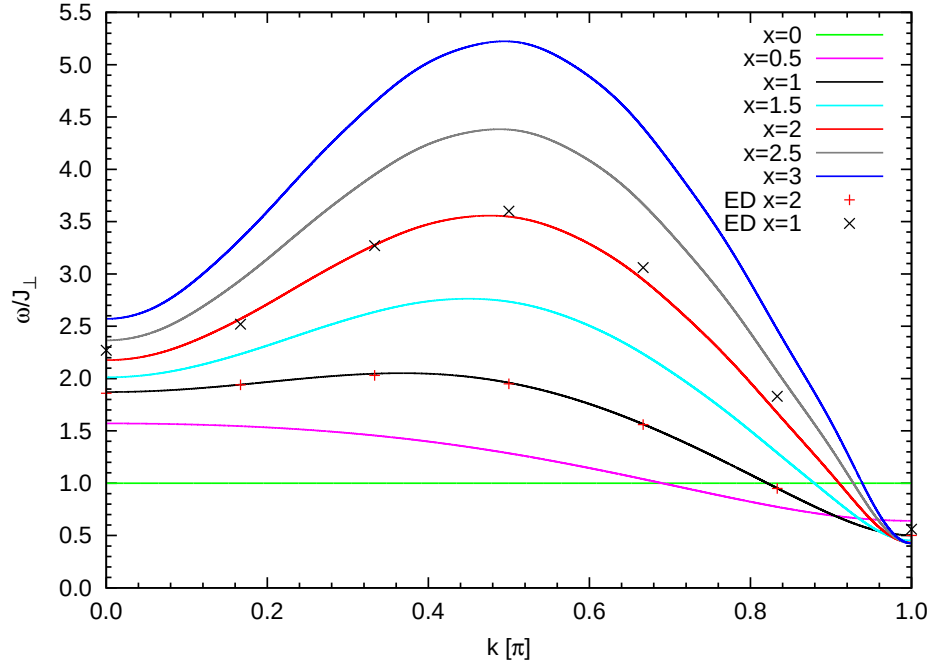


Abbildung 5.1.11: Dispersion der direkten Auswertung (Ordnung 15) für die x -Werte 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3. Zusätzlich ist für $x = 1$ und $x = 2$ die Resultate einer exakten Diagonalisierungsrechnung (ED) [18] dargestellt.

Die Dispersionen in 15. Ordnung der direkten Auswertung sind in Abbildung 5.1.11 dargestellt. Zusätzlich sind die Resultate einer exakten Diagonalisierungsrechnung [18] abgebildet. Sie zeigen qualitativ den selbem Verlauf, wie die Dispersion der direkten Auswertung. Die dazugehörige ROD, siehe Abbildung 5.1.12 zeigt wieder eine sehr gute Konvergenz.

Die Dispersionen zeigen qualitativ dasselbe Verhalten wie die perturbativen Resultate. Jedoch unterscheiden sich für größere x -Werte. Zum einen liegt die Dispersionskurve der direkte Auswertung höher als die perturbative. Besonders auffällig ist das Verhalten bei $k = 0$. Bei der direkten Auswertung wird mit größer werdenden x der Wert an dieser Stelle größer und bei der perturbativen wird er ab $x \approx 1.2$ kleiner. Auch bei $k = \pi/2$ lässt sich die Abweichung gut erkennen. Zwar ist für große x bei beiden Kurven an dieser Stelle das Maximum, jedoch ist der direkt ausgewertete Wert immer größer.

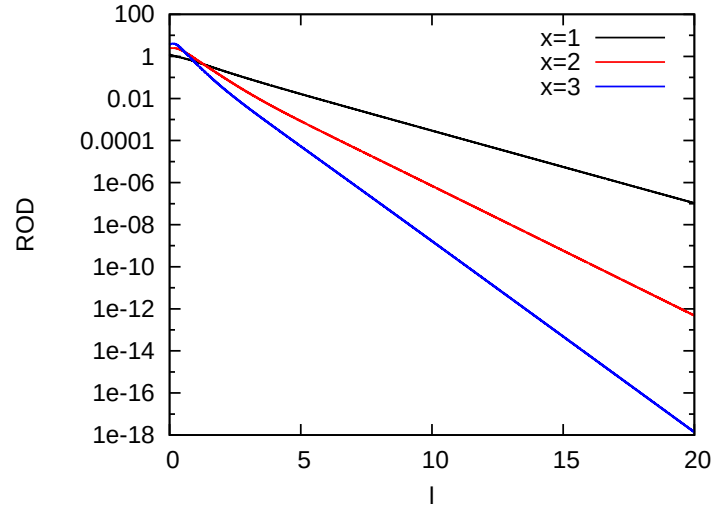


Abbildung 5.1.12: ROD der direkten Auswertung (Ordnung 15) für die x -Werte 1, 2, 3.

Diese Unterschiede lassen sich sehr gut an Abbildung 5.1.13 erkennen. Dort sind die Dispersionen der direkten und perturbativen Auswertung für $x = 1.5$ dargestellt.

Aufgrund dieser Unterschiede ist für $x = 1.5$ die perturbative Dispersion $\omega(p, k)$ zusätzlich mit einem Padé[2,13] extrapoliert worden, siehe Abbildung 5.1.13. Wie man erkennt, stimmen die Dispersionen der direkten Auswertung und der Padé-Extrapolation für $k \geq \pi/2$ sehr gut überein. Jedoch weichen diese für $k \leq \pi/2$ signifikant ab. Desweiteren besitzt die Dispersion der Padé-Extrapolation bei $k = 0.4\pi$ einen Knick. Die Form dieser Kurve lässt sich vermutlich mit dem 3-Teilchen-Kontinuum erklären [13]. Bei diesem x -Wert können das 3-Teilchen-Kontinuum mit einem gebundenen Zustand und die Dispersion überlappen. Die Dispersion würde dann in das Kontinuum eintauchen [13]. Die Dispersion der Padé-Extrapolation liefert vermutlich im Bereich $k < 0.4\pi$ die Kontinuums-kante und das kann die Ursache des Knicks sein. Die Dispersion der direkten Auswertung hingegen ist sehr robust und folgt der ins Kontinuum eintauchenden Dispersion.

Um diese Idee zu überprüfen ist das 3-Teilchen-Kontinuum mit einem ge-

bundenen Zustand basierend auf einer S-CUT-Rechnung [35] berechnet worden. Dabei wurde eine Trunkierung von $(10,6,6,4,4,3,3)$ gewählt. Diese Trunkierung ist so klein gewählt worden, damit das System noch konvergiert. Das Kontinuum und die Dispersion dieser Rechnung ist in Abbildung 5.1.13 dargestellt. Die Resultate stützen die skizzierte Erklärung, da der Knick in der extrapolierten Dispersion gerade ein frühes Eintauchen ins 3-Teilchen-Kontinuum vermeidet.

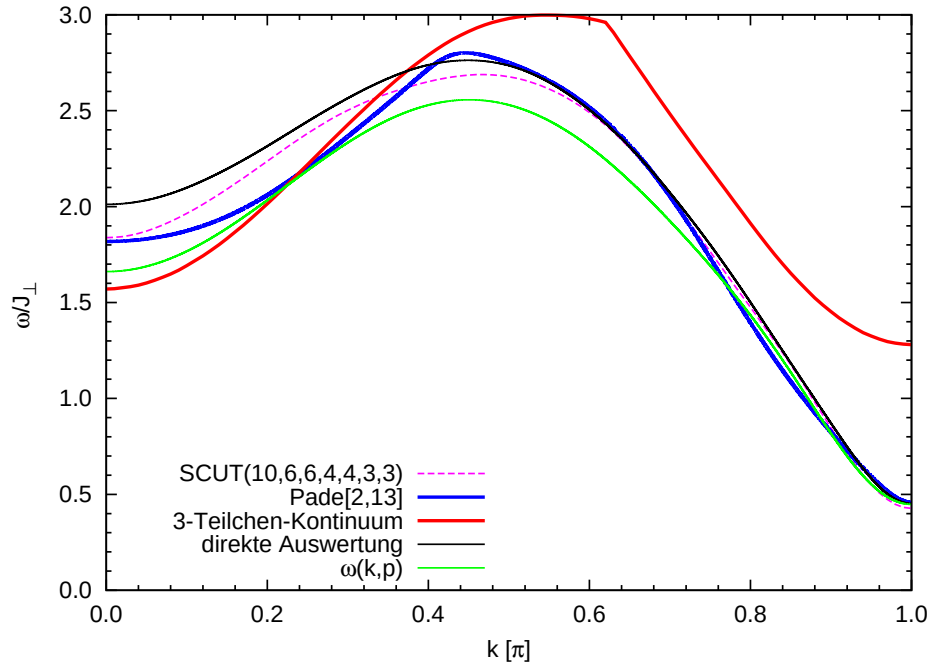


Abbildung 5.1.13: Die Dispersion für $x = 1.5$. Abgebildet sind die direkte Auswertung und die perturbative Auswertung als Reihe in p . Desweiteren eine Padé-Extrapolation der Reihe in p und die Dispersion einer S-CUT-Rechnung [35]. Basierend auf dieser S-CUT-Rechnung ist ebenfalls das 3-Teilchen-Kontinuum abgebildet [35].

Sollte dies tatsächlich der Grund sein, so besitzt die perturbative Auswertung einen Vorteil gegenüber der direkten, da sie die Einflüsse höherer Teilchenräume berücksichtigt, wenn sie extrapoliert wird. Allerdings kann man auch umgekehrt die Robustheit der direkten Auswertung begrüßen, deren

Ergebnis der eintauchenden Dispersion folgt.

Allgemein lässt sich aber sagen, dass sowohl die direkte als auch die perturbative Auswertung für kleine x -Werte sehr gut funktionieren. Die direkte Auswertung zeichnet sich weiterhin durch eine robuste Beschreibung des Modells bis $x \approx 3$ aus.

5.1.3 DIMPY

Da die direkte Auswertung auch bei großen x -Kopplungen sehr stabil läuft, ist es möglich, mit dieser Methode die x -Kopplung von DIMPY [25, 26] zu bestimmen. DIMPY ist ein Material, welches eine starke Holmkopplung von $x \approx 2$ besitzt. Die x -Kopplung wird mit Hilfe der direkten Auswertung über die im Experiment gemessene Dispersion [25] bestimmt. Dazu wird die theoretische Dispersion bestimmt, die am besten mit der experimentiellen Dispersion übereinstimmt. Dabei geht man wie folgt vor:

Aus den experimentiellen Daten, siehe Abbildung 5.1.15, wird das Verhältnis aus den Werten für $k = \pi$ und $k = 3/2\pi$ bestimmt. Dieses Verhältnis wird für die theoretisch direkt berechneten Dispersionen in 15. Ordnung für verschiedene x -Werte bestimmt, siehe Abbildung 5.1.14. Durch den Schnittpunkt aus experimentellem Verhältnis und der Theoriekurve lässt sich die x -Kopplung zu ungefähr $x \approx 1.89$ bestimmen.

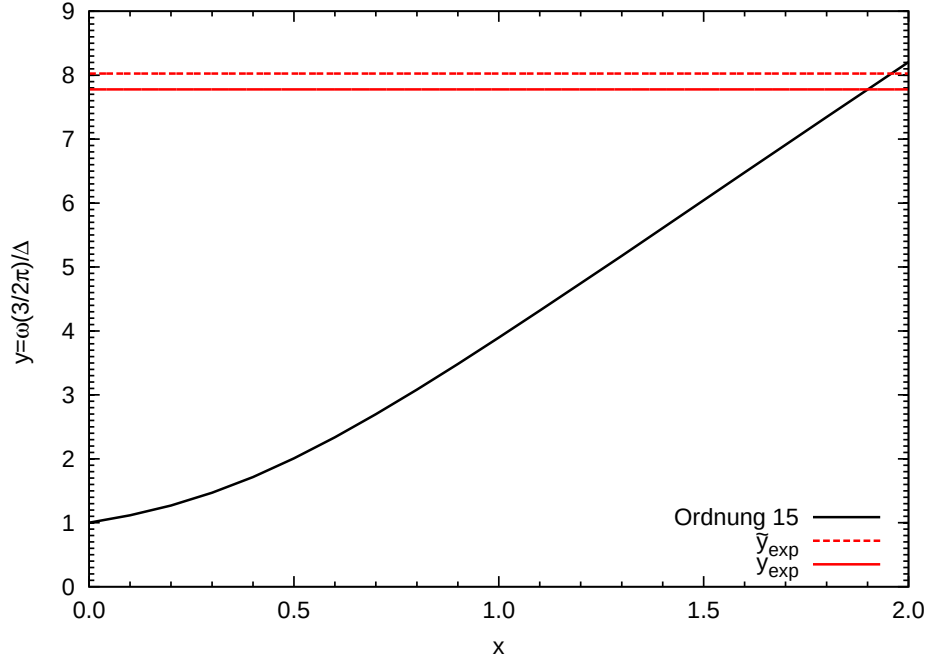


Abbildung 5.1.14: Vergleich des Verhältnisses $\omega(3/2\pi)/\omega(\pi)$ zwischen Experiment y_{exp} [27, 25] und direkter Auswertung in 15. Ordnung. $\tilde{y}_{exp}$ ist das Verhältnis mit herabgesetzter Energielücke. Der Schnittpunkt ergibt den gesuchten x -Wert.

Da die direkte Dispersion in Einheiten der $J_{\perp}$ -Kopplung berechnet wurde, muss zunächst die $J_{\perp}$ -Kopplung bestimmt werden. Damit kann man dann die Dispersion $\omega(k)$ bestimmen. Die $J_{\perp}$ -Kopplung wird aus dem Verhältnis des theoretischen und experimentiellen Wertes von $\omega(3/2\pi)$

$$J_{\perp} = \frac{\omega(3/2\pi)_{exp}}{\omega(3/2\pi)_{direkt}} \quad (5.1.13)$$

bestimmt. Damit lässt sich die Dispersion

$$\omega(k) = \frac{\omega(k)}{J_{\perp}} J_{\perp} = \frac{\omega(k)}{J_{\perp}} \frac{\omega(3/2\pi)_{exp}}{\omega(3/2\pi)_{direkt}} \quad (5.1.14)$$

bestimmen. Die so bestimmte Dispersion und die experimentiellen Daten sind in Abbildung 5.1.15 dargestellt. Die Theoriekurve stimmt extrem gut

mit den Messwerten überein. Jedoch ist eine gewisse Abweichung an den Stellen um $k = 0$ bzw. $k = 2\pi$ zu erkennen. Daraufhin ist der x -Wert für ein tieferliegende Energielücke bestimmt worden, da die direkte Auswertung die Energielücke nicht genau bestimmen kann. Dazu wurde die experimentielle Energielücke um den Fehler $\sigma_\Delta = 0.01$ [27], welcher aus den experimentiellen Daten stammt, herabgesetzt. Damit erhält man für die Kopplung $x \approx 1.95$. Die dazugehörige Dispersion ist in Abbildung 5.1.15 zu sehen. Sie liegt auch bei $k = 0$ sehr gut auf den experimentiellen Daten.

Der in Referenz [25] abgeschätzten x -Wert von $x \approx 2$ wird durch die Rechnung der EP-CUT quantitativ und in hoher Genauigkeit bestätigt.

Das Kapitel 5.1 hat gezeigt, dass sich die EP-CUT erfolgreich für das Modell der Spinleiter in Theorie und Experiment etabliert hat.

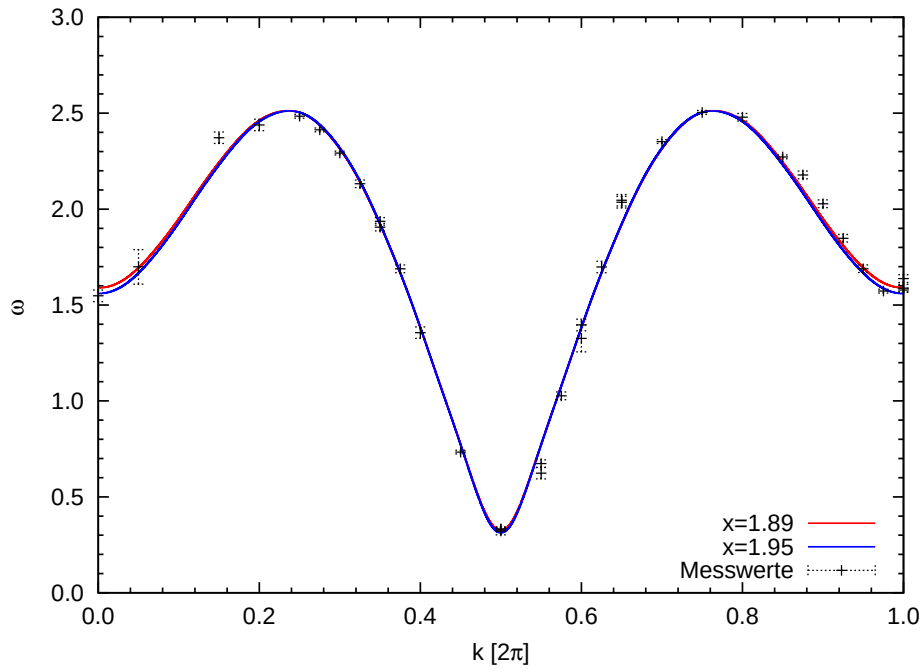


Abbildung 5.1.15: Theoretische und experimentelle Triplondispersion für DIMPY.

5.2 Alternierende Spinleiter

Da die alternierende Spinleiter kein äquidistantes Energiespektrum in H_0 besitzt, kann man mit diesem Modell gut die konzeptionelle Vorteile der EP-CUT gegenüber der P-CUT zeigen. Dabei werden auch hier die Grundzustandsenergie (Kap. 5.2.1) und die Dispersion (Kap. 5.2.2) bestimmt und diskutiert.

5.2.1 Grundzustand

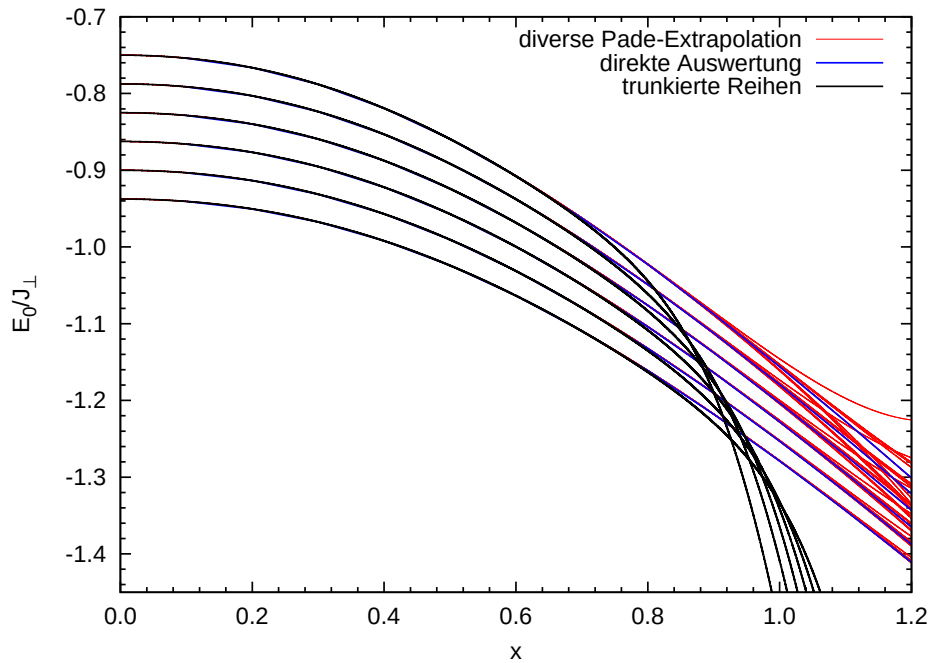


Abbildung 5.2.1: Grundzustandsenergie der alternierenden Spinleiter für die Kopplungen $J'_\perp = 1, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5$. Abgebildet sind in schwarz die trunkierten Reihen, in rot diverse Padé-Extrapolationen ($[12,4], [11,5], [10,6], [9,7], [8,8], [7,9], [4,12]$) und in blau die direkt bestimmten Werte.

Für die Berechnung der Grundzustandsenergie wurde der 0n-Generator verwendet. Mit Hilfe der Optimierungen konnte die 16. Ordnung erreicht werden. Da aufgrund der größeren Elementarzelle der Hamiltonoperator mehr Ter-

me besitzt, konnten nicht die selbe Ordnung, wie bei der Spinleiter, erreicht werden. Das erzeugte Differentialgleichungssystem kann für verschiedene $J'_\perp$ -Kopplungen ausgewertet werden, wo es für jedes $J'_\perp$ gelöst werden muss. Da in diesem Modell die Elementarzelle zwei Sprossen beinhaltet, berechnet sich die Grundzustandsenergie pro Sprosse gemäß

$$E_0 = \frac{h_0(l_{\max})}{2}. \quad (5.2.1)$$

Die Grundzustandsenergien für verschiedene $J'_\perp$ -Kopplungen in 16. Ordnung sind in Abbildung 5.2.1 zu sehen. Abgebildet sind die Ergebnisse der perturbativen und direkten Auswertung. Die Koeffizienten der trunkierten Reihe sind im Anhang 7.2 angegeben. Die trunkierte Reihe wurde wieder mit verschiedenen Padé-Approximanten extrapoliert. Wie man an den Ergebnissen der perturbativen Auswertung sieht, ist diesen Reihen je nach $J'_\perp$ -Kopplung bis zu unterschiedlichen x -Werten zu trauen. Für $J'_\perp = 1$ ist der trunkierten Reihe ungefähr bis $x \approx 0.7$ zu trauen. Die verschiedenen Padé-Extrapolationen laufen schon bei ungefähr $x \approx 0.82$ auseinander. Für $J'_\perp = 1.5$ ist der trunkierten Reihe bis $x \approx 0.8$ zu trauen und die Padé-Extrapolationen liegen bis $x = 1$ noch alle gut übereinander. Dieses Verhalten lässt sich wie folgt erklären:

In einem System mit kleiner $J'_\perp$ -Kopplung, zum Beispiel 1.0 oder 1.1, ist ein Wert von $x = 0.7$ ein großer Wert im Verhältnis zu den anderen Kopplungen, so dass dieser Störparameter nicht mehr klein gegenüber den anderen Größen des Systems ist.

Für größere $J'_\perp$ -Kopplungen, z.B. 1.5, ist $x = 0.7$ im Verhältnis zu der $J'_\perp$ -Kopplung kleiner als vorher. Deshalb ist in diesem Fall x noch klein gegenüber den anderen Kopplungen und daher divergiert die Reihe erst bei einem höheren x -Wert.

Die direkte Auswertung ist für dieses Modell wieder sehr stabil, auch für relativ große x -Werte. Wie man an der Abbildung 5.2.1 erkennt, liefert sie wieder eine sehr gute Extrapolation der trunkierten Reihe. Dass diese Auswertung wiederholt gute Ergebnisse für große x -Werte liefert, lässt sich auch an Abbildung 5.2.3 erkennen. In dieser Abbildung ist die Energie für den

Fall $J'_\perp = 1.2$ bis $x = 2$ berechnet worden. Die Konvergenz dieser Methode ist auch sehr gut, wie man an der in Abbildung 5.2.2 dargestellten ROD erkennen kann.

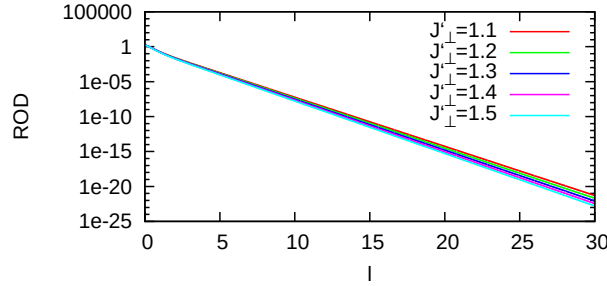


Abbildung 5.2.2: ROD der direkten Auswertung für $x = 1$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen.

Wie Abbildung 5.2.1 zeigt, liefern beide Auswertungen die in Kapitel 3.2 vorhergesagten Eigenschaften der Grundzustandsenergie. Für $J'_\perp = 1$ erhält man wieder die Ergebnisse der Spinleiter. Desweiteren wird die Energie mit größerer $J'_\perp$ -Kopplung abgesenkt. Es lässt sich also gut erkennen, dass diese Methode qualitativ die vorhergesagten Ergebnisse liefert. Um nun aber auch zu zeigen, dass die Ergebnisse nicht nur qualitativ sondern auch quantitativ stimmen, werden sie mit einer anderen Methode verglichen.

Dazu wurde eine S-CUT-Rechnung [28] für $J'_\perp = 1.2$ mit dem 0n-Generator und einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4) durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.2.3 dargestellt. In dieser Abbildung sind weiterhin die Resultate der direkten Auswertung und die trunkierte Reihe, sowie die beste Padé-Extrapolation der perturbativen Auswertung abgebildet. Die S-CUT Daten stimmen sehr gut mit denen der EP-CUT überein. Die Abweichungen zwischen direkter und S-CUT Auswertung sind zusätzlich im Ausschnitt dieser Abbildung abgebildet. Wie man an diesen erkennt, sind die Abweichungen für kleine x -Werte sehr gering und sie werden erst mit größer werdenden x signifikant. Jedoch bleiben sie allgemein sehr klein.

Somit ist gezeigt, dass die in der EP-CUT eingebaute Verbesserung funktioniert. Damit ist eine konzeptionelle Verbesserung zur P-CUT erreicht worden.

Die P-CUT ist durch ein äquidistantes Energiespektrum in H_0 eingeschränkt und kann deshalb dieses Modell nicht bearbeiten. Zur Festigung der These, dass die eingebaute Verbesserung der EP-CUT funktioniert, wird zusätzlich noch die Dispersion betrachtet.

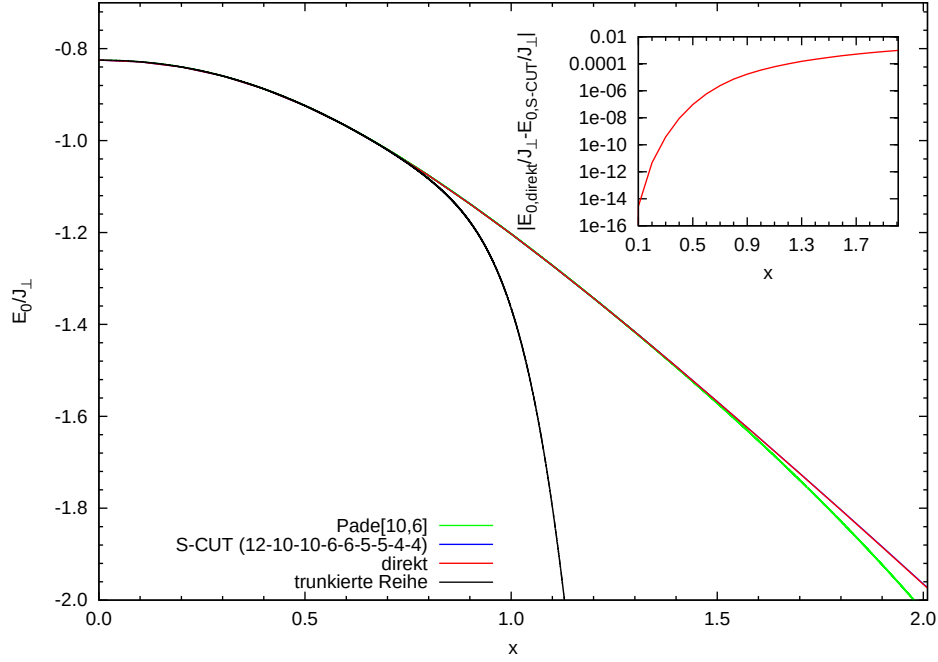


Abbildung 5.2.3: Abgebildet ist die Grundzustandsenergie für $J'_\perp = 1.2$ der direkten Auswertung, der perturbativen Auswertung und einer S-CUT-Rechnung [28] mit den 0n-Generator und einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4). Es sind die trunkierte Reihe und die beste Padé-Extrapolation ([10,6]) abgebildet. Im Ausschnitt ist die Abweichung der direkten Auswertung relativ zur S-CUT [28] dargestellt.

5.2.2 Dispersion

Der effektive Hamiltonoperator im Einteilchenraum wurde in diesem Fall bis zur 13. Ordnung bestimmt. Die Dispersion der alternierenden Spinleiter lässt sich mit Hilfe der Fouriertransformation aus dem (1,1)-Block des effektiven Hamiltonoperators bestimmen. Dabei ist zu beachten, dass die Elementarzelle zwei Sprossen beinhaltet, die Sprosse mit Kopplung 1 und die mit Kopp-

lung $J'_\perp$. Man erhält bei der Fouriertransformation eine 2×2 Matrix

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} M_{11}(x, k) & M_{12}(x, k) \\ M_{21}(x, k) & M_{22}(x, k) \end{pmatrix}, \quad (5.2.2)$$

wobei in $M_{11}(x, k)$ alle Terme stehen, die ein Hüpfen von Sprossen mit Kopplung 1 zu einer Sprosse mit Kopplung 1 beschreiben. In $M_{22}(x, k)$ stehen alle Hüpfsterme, die ein Hüpfen von einer Sprosse mit Kopplung $J'_\perp$ zu einer mit Kopplung $J'_\perp$ beschreiben. Die Beiträge, die ein Hüpfen zwischen den unterschiedlichen Sprossen beschreiben, stehen in $M_{1,2}(x, k)$. Dabei gilt aus Symmetriegründen, dass $M_{12}(x, k) = M_{21}(x, k)$ ist. Die einzelnen $M_{i,j}(x, k)$ berechnen sich analog zur Fouriertransformation aus der Gleichung 5.1.3. Die Abhängigkeit der $M_{i,j}$ wird im Folgenden der Übersicht halber weggelassen. Um die Dispersion zu bestimmen muss die Matrix $\underline{\underline{M}}$ diagonalisiert werden. Daraus erhält man die folgenden zwei Dispersionsäste

$$\omega_\pm(k) = \frac{M_{11} + M_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(M_{11} - M_{22})^2}{4} + M_{12}^2}. \quad (5.2.3)$$

Für die perturbative Auswertung erhält man die in Abbildung 5.2.5 dargestellten Dispersionen. Die Koeffizienten für die Dispersion mit $J'_\perp = 1.2$ stehen im Anhang 7.2.3. In Abbildung 5.2.5a ist die trunkierte Dispersion für $x = 0.5$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen dargestellt. In Abbildung 5.2.5b ist die über einen internen Parameter ausgedrückte Dispersion für $x = 1$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen zu sehen.

Anders als für die Spinleiter kann man hier nicht die Energielücke als internen Parameter wählen, da die Lücke in diesem Fall nicht mehr linear in x ist für $x \rightarrow 0$. Deshalb muss man einen anderen Parameter wählen, der diese Bedingung erfüllt. Dazu wird der Ausdruck

$$\tilde{\Delta}(x) = \frac{2}{1 + J'_\perp} \left(\frac{M_{11}(x, k=0) + M_{22}(x, k=0)}{2} - |M_{12}(x, k=0)| \right) \quad (5.2.4)$$

verwendet. Dieser Ausdruck ist deshalb gewählt worden, da er der wahren Energielücke ähnlich ist und für $x \rightarrow \infty$ und $J'_\perp = 1$ in $\Delta(x)$ übergeht. Der interne Parameter wird wieder mit einen dlogPadé extrapoliert, siehe Abbildung 5.2.4.

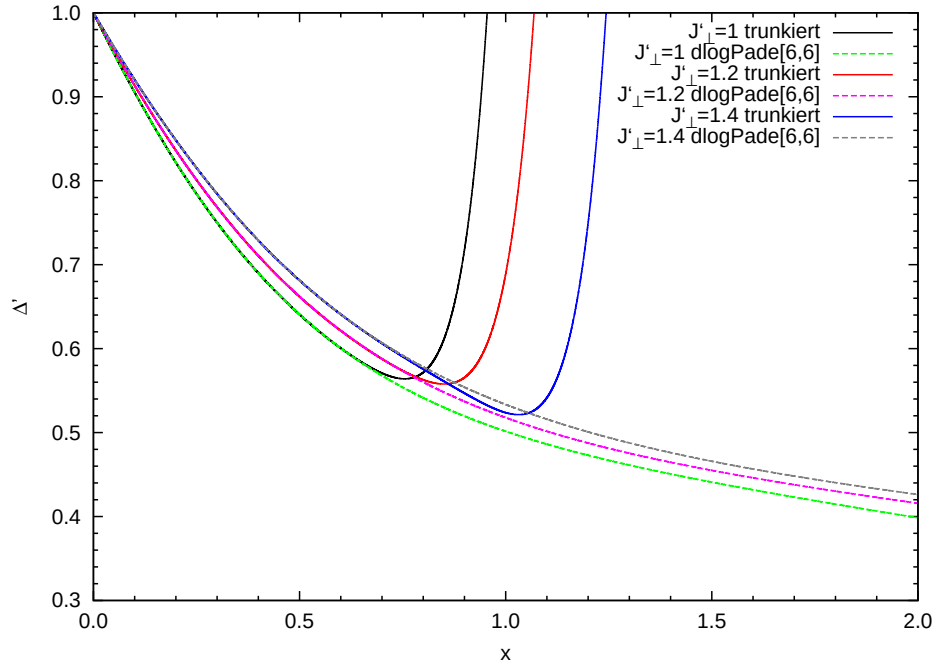


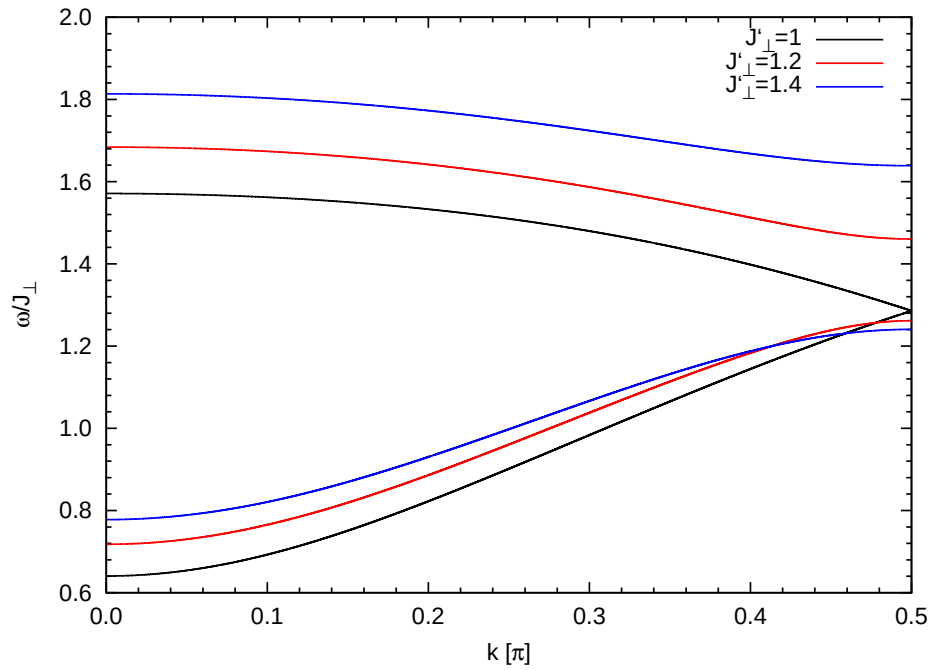
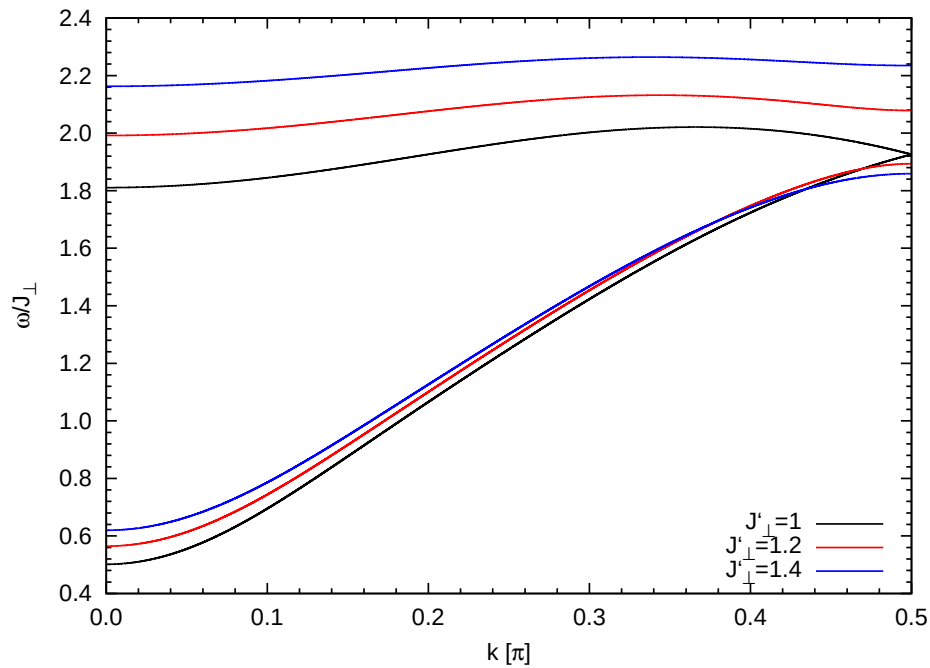
Abbildung 5.2.4: Die trunkeerten Reihen sowie dlogPadé-Extrapolationen von $\tilde{\Delta}(x)$ für verschiedene $J'_\perp$ -Kopplungen.

Mit dieser Extrapolation von $\tilde{\Delta}(x)$ lässt sich der interne Parameter als

$$p(x) = 1 - \tilde{\Delta}(x) \quad (5.2.5)$$

definieren. Die Extrapolation über den internen Parameter wird wieder nach bekanntem Vorgehen durchgeführt.

Die berechneten Dispersionen zeigen das bereits in Kapitel 3.2 diskutierte Verhalten.

(a) Die trunkierte Reihe für $x = 0.5$.(b) Reihe über internen Parameter für $x = 1$.Abbildung 5.2.5: Dispersionen der perturbativen Auswertung für verschiedene x - und $J'_\perp$ -Werte.

Für $J'_\perp = 1$ erhält man die gleichen Koeffizienten wie bei der Spinleiter. Für eine $J'_\perp$ -Kopplung, die größer ist als 1, erhält man am Rand der Brillouinzone ($k = \pi/2$) eine Lücke. Diese Lücke wird mit anwachsender $J'_\perp$ -Kopplung größer.

Um zu zeigen, dass die perturbative Auswertung nicht nur qualitativ gute Resultate sondern auch quantitativ gute Ergebnisse liefert, werden diese Ergebnisse mit der direkten Auswertung sowie einer S-CUT-Rechnung verglichen. Zunächst soll die direkte Auswertung diskutiert werden. Die Dispersionen für $x = 0.5$ und $x = 1$ (Abb. 5.2.7) für verschiedene $J'_\perp$ -Kopplungen zeigen das gleiche Verhalten wie die perturbative Auswertung. Auch die ROD, siehe Abbildung 5.2.6, zeigt eine gute Konvergenz des Differentialgleichungssystems.

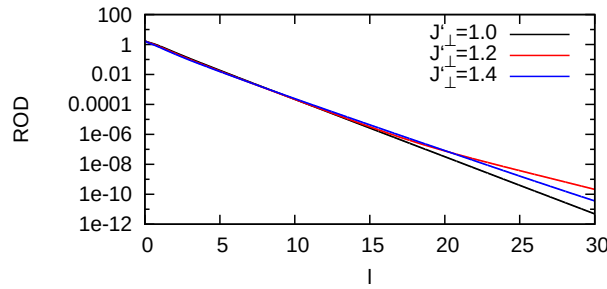


Abbildung 5.2.6: ROD der direkten Auswertung für $x = 1$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen.

Diese beiden Auswertungen stimmen gut überein, was man an Abbildung 5.2.8 gut erkennen kann. In dieser Abbildung sind die Dispersionen für $x = 0.5$ und $J'_\perp = 1.2$ der beiden Auswertungsarten zu sehen. Desweiteren ist die Dispersion einer S-CUT-Rechnung [28] mit 0n:1n-Generator und einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4) abgebildet. Alle drei Dispersionen liegen sehr gut übereinander. Im Ausschnitt ist die Abweichung der Dispersionen zu sehen. Hier wurde die Dispersion der perturbativen Auswertung als Referenzdispersion gewählt. Um die Abweichung von ihr zu bestimmen, wurde sie von den anderen beiden Dispersionen abgezogen. Wie man erkennt, sind die Abweichungen sehr gering.

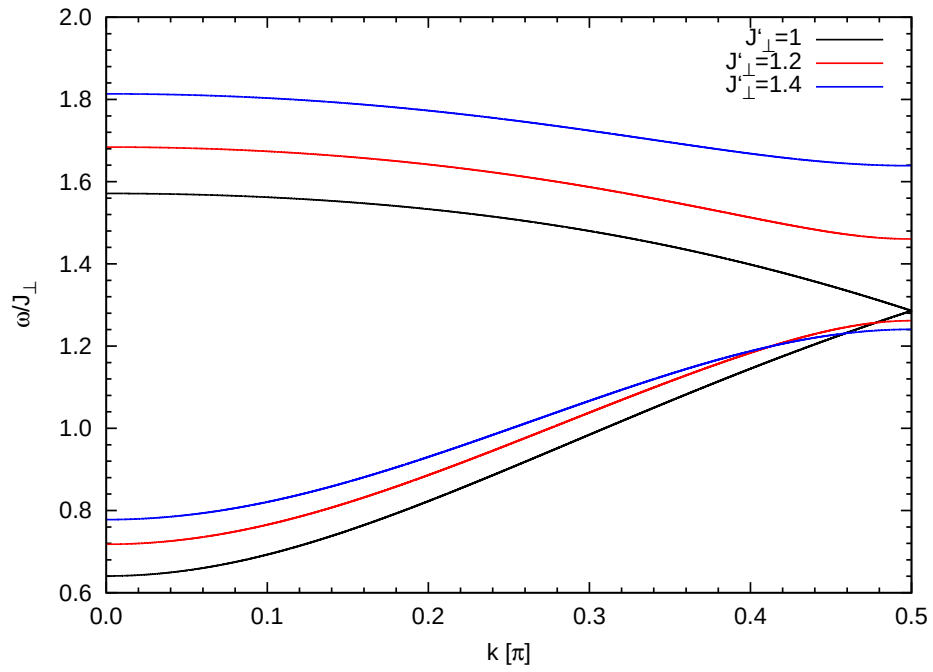
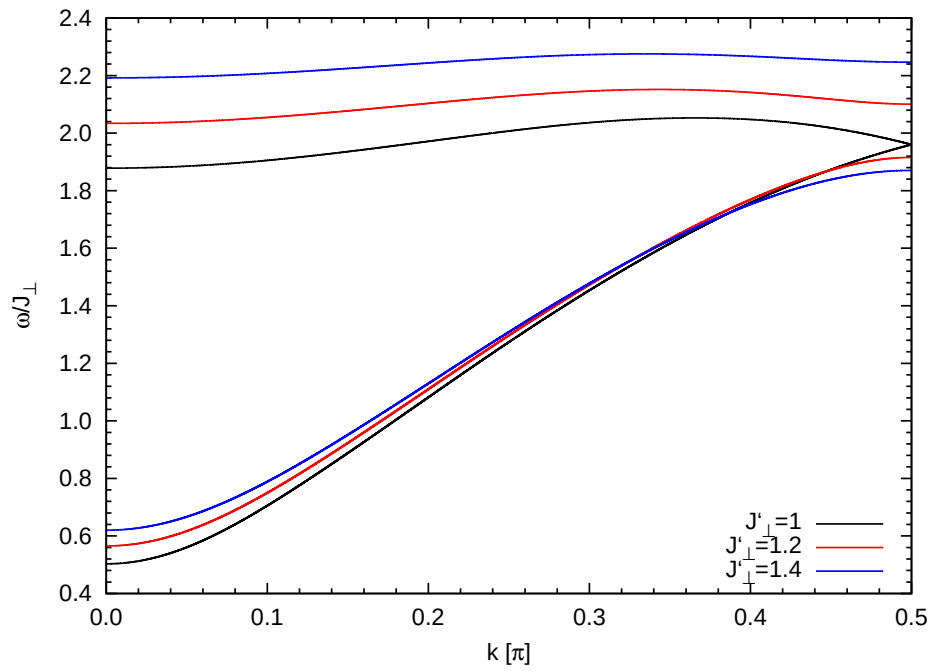
(a) $x = 0.5$.(b) $x = 1$.

Abbildung 5.2.7: Dispersionen der direkten Auswertung für verschiedene x - und $J'_{\perp}$ -Werte.

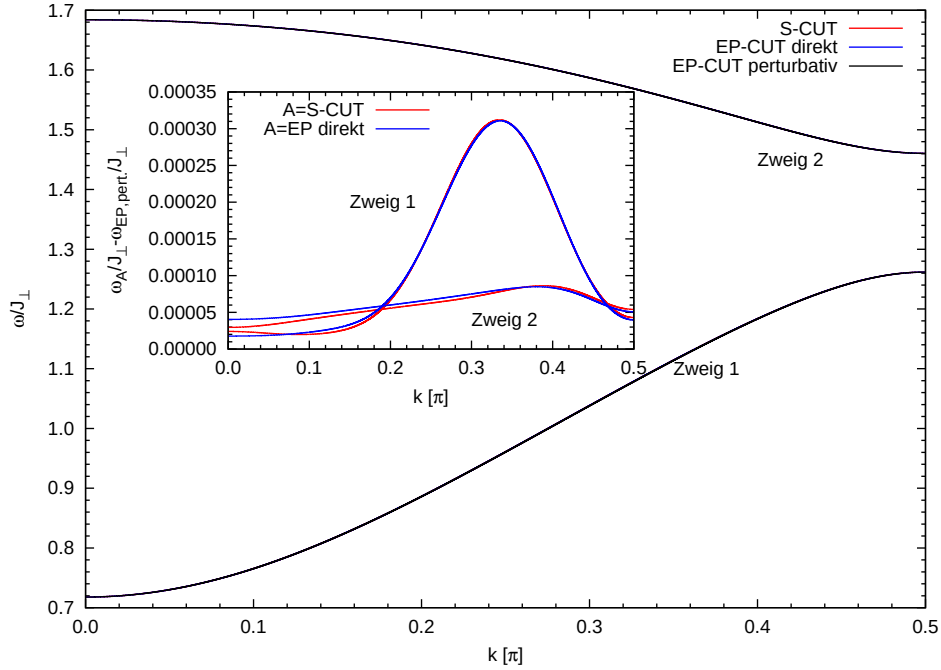


Abbildung 5.2.8: Abgebildet ist die Dispersion für $x = 0.5$ und $J'_\perp = 1.2$, die aus verschiedenen Methoden berechnet wurde. Es sind die EP-CUT mit direkter und perturbativer Auswertung und eine S-CUT-Rechnung mit einer Trunkierung von $(12,10,10,6,6,5,5,4,4)$ gewählt worden. Im Ausschnitt ist die Abweichung von direkter und S-CUT zur perturbativen Dispersion gezeigt. Zweig 1 entspricht dem unteren Zweig und Zweig 2 dem oberen.

Die größte Abweichung existiert im unteren Zweig (Zweig 1). Aber auch diese Abweichung ist nicht sehr groß.

Die Ergebnisse des Einteilchenraums zeigen, wie die Ergebnisse des 0-Teilchenraums (Kapitel 5.2.1), dass diese CUT-Methode auch für nicht äquidistante Energiespektren funktioniert. Damit ist die wesentliche konzeptionelle Verbesserung zur P-CUT auch praktisch gezeigt worden.

6 Zusammenfassung

6.1 Fazit

Mit der EP-CUT ist eine Methode entwickelt worden, welche die P-CUT konzeptionell verbessert. Es existiert nun eine perturbative CUT, die nicht auf ein äquidistantes Energiespektrum des ungestörten Systems eingeschränkt ist. Dieses Hauptziel wurde erreicht, wie die Beschreibung der alternierenden Spinleiter (Kap. 5.2) gezeigt hat.

Desweiteren wurde gezeigt, dass man mit Hilfe der Optimierungen, siehe Kapitel 4.3, eine sehr hohe Effizienz erreichen kann. Es wurden sehr hohe Ordnungen erreicht, zum Beispiel die 17. Ordnung im 0-Teilchenraum, siehe Kapitel 5.1.1. Die Auswahlregeln (Kap. 4.3.2) zeigen die hohe Flexibilität dieser Methode. Es lassen sich zu jedem System spezifische Regeln bestimmen, die das Aufstellen des Differentialgleichungssystems sehr effizient machen.

Ein weiterer Vorteil dieser Methode ist die Vielseitigkeit in der Auswertung. Mit perturbativer und direkter Auswertung besitzt die EP-CUT gleich zwei verschiedene Auswertungsarten. Wichtig hierbei ist es, dass beide Auswertungen das gleiche Differentialgleichungssystem verwenden. Das heißt, dass dieses nur einmal berechnet werden muss. Dies zeigt wieder die Effizienz dieser Methode. Ein zusätzlicher Vorteil der beiden Auswertungen ist, dass man die Konsistenz der Methode überprüfen kann, denn für kleine x -Werte sollten sowohl die perturbative als auch die direkte Auswertung dieselben Resultate ergeben.

Dass die EP-CUT funktioniert, wurde in Kapitel 5 eindrucksvoll gezeigt. Bei der Spinleiter stimmen die Resultate sehr gut mit denen anderer Methode [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24] überein. Die Koeffizienten der perturbativen Auswertung stimmten auch sehr gut mit denen der P-CUT [23] überein.

Die Resultate der alternierenden Spinleiter zeigen sehr gut die Funktionalität auch bei einem nichtäquidistanten Energiespektrum. Auch der Vergleich mit der S-CUT Rechnung [28] unterstreicht dieses nochmal.

Es wurde gezeigt, dass diese Methode nicht nur die Ergebnisse der P-CUT reproduzieren kann, sondern auch über die P-CUT hinaus Anwendung fin-

det.

Desweiteren besitzt die EP-CUT mit der direkten Auswertung eine Auswertung, die auch für große Werte des Entwicklungsparameters sehr robuste Ergebnisse liefert. Damit konnte das Material DIMPY sehr gut beschrieben werden, siehe Kapitel 5.1.3.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Methode ist eine sehr effiziente, flexible und vielseitige Methode. Damit besitzt sie alle Vorraussetzungen, um auf viele weitere Modelle angewandt zu werden.

6.2 Ausblick

Die Verbesserung der EP-CUT gegenüber der P-CUT ermöglicht nun die perturbative Auswertung mit Hilfe einer CUT von verschiedenen Modellen, die man mit der P-CUT nicht bearbeiten konnten. Nun lassen sich auch Modelle mit nicht äquidistantem Energiespektrum auf diese Art lösen.

Zur effektiven Umsetzung helfen dabei die Auswahlregeln, da sich spezifisch für jedes Problem aufstellen lassen. Damit erhält man eine Menge Anwendungsmöglichkeiten für die EP-CUT-Methode.

Neben der in dieser Arbeit vorgestellten Transformation des Hamiltonoperators ist eine effektive Umsetzung der Observablentransformation geplant [36]. Damit lassen sich viele experimentiell interessante Messgrößen auch theoretisch erfassen, so dass quantitative Vergleiche mit experimentellen Daten möglich werden.

7 Anhang

7.1 Extrapolationen

In diesem Kapitel werden die Extrapolationsmethoden vorgestellt, welche in dieser Arbeit genutzt werden. Als erstes wird die Padé-Extrapolation erläutert, welche für die Extrapolation der Grundzustandsenergie verwendet wird. Die in Kapitel 7.1.2 beschriebene dlogPadé-Extrapolation wird für die Extrapolation des internen Parameters benötigt. Mit Hilfe des internen Parameters lässt sich die Dispersion extrapolieren.

7.1.1 Padé-Extrapolation

Die Padé-Extrapolation ist eine rationale Approximation einer Reihe

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\text{Max}} a_n x^n \quad (7.1.1)$$

in einem Intervall $l = [a, b]$. Sie bildet sich aus dem Quotienten zweier Polynome $P_n(x)$ und $Q_m(x)$ des n -ten bzw. m -ten Grades. Dabei gilt $n + m = \text{Max}$. Man erhält

$$Q_{n,m}(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \cdots + p_n x^n}{q_0 + q_1 x + q_2 x^2 + \cdots + q_m x^m}, \quad (7.1.2)$$

mit der Eigenschaft, dass die Taylorreihe von $Q_{n,m}$ mit F bis Ordnung Max identisch ist.

Die in dieser Arbeit berechneten Padé-Extrapolationen wurden mit MAPLE berechnet.

Man sollte bei dieser Extrapolation beachten, dass im Intervall l keine Nullstellen im Nennerpolynom vorhanden sind. Existieren solche Padé-Extrapolation, so müssen diese ausgeschlossen werden.

7.1.2 dlogPadé-Extrapolation

Die dlogPadé-Extrapolation ist eine nützliche Extrapolation für verschwindende oder divergierende Größen wie die Energielücke.

Startpunkt dieser ist eine Reihe der Form

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\text{Max}} a_n x^n = 1 + a_1 x^1 + a_2 x^2 + \dots \quad (7.1.3)$$

Diese Reihe unterscheidet sich von der aus Gleichung 7.1.1 dadurch, dass hier $a_0 = 1$ normiert ist.

Die dlogPadé-Extrapolation ist eine Padé-Extrapolation der Ableitung des Logarithmus dieser Reihe, also

$$\frac{d}{dx} \ln(F(x)) = \frac{F'(x)}{F(x)} = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)}. \quad (7.1.4)$$

Dabei sind $P_n(x)$ bzw. $Q_m(x)$ wieder Polynome mit n -ter bzw. m -ter Ordnung. Diesmal gilt für die Ordnung jedoch $m + n = \text{Max} - 1$, da durch das Ableiten die Information über einen Koeffizienten verloren gegangen ist.

Die dlogPadé-Extrapolation der Reihe $F(x)$ ist nun definiert als

$$dlogP[n, m](x) = \exp \left(\int_0^x \frac{P_n(x')}{Q_m(x')} dx' \right). \quad (7.1.5)$$

7.2 Koeffizienten

7.2.1 Koeffizienten: Dispersion der Spinleiter

Ordnung	Koeffizienten	Ordnung	Koeffizienten	Ordnung	Koeffizienten
t_0		5	-0.04687500	10	-0.12947965
0	1	6	-0.15820313	11	-0.11682585
1	0	7	-0.11114502	12	0.19740278
2	0.75000000	8	0.13763428	13	0.57210467
3	0.37500000	9	0.37034416	14	0.26874640
4	-0.20312499	10	0.21864462	15	-1.06182222
5	-0.62500000	11	-0.40222562	t_8	
6	-0.50000000	12	-0.90268454	8	-0.01309204
7	0.29663086	13	-0.33963371	9	-0.02819824
8	1.12030030	14	1.36473269	10	0.01595318
9	0.90001680	15	2.41431850	11	0.12834901
10	-0.75448108	t_4		12	0.13062643
11	-2.44631335	4	-0.03906250	13	-0.20082120
12	-1.60154019	5	-0.04687500	14	-0.64685442
13	2.59697176	6	0.03564453	15	-0.34698491
14	6.30730682	7	0.13452148	t_9	
15	2.83300346	8	0.08452606	9	0.01091003
t_1		9	-0.16891479	10	0.02618408
1	0.5	10	-0.37874413	11	-0.01227187
2	0	11	-0.12521664	12	-0.12730413
3	-0.12500000	12	0.63520241	13	-0.14531211
4	-0.15625000	13	1.09758909	14	0.20129516
5	-0.10156250	14	0.10661141	15	0.72601478
6	0.04687500	15	-2.19284584	t_{10}	
7	0.16467285	t_5		10	-0.00927353
8	0.12779236	5	0.02734375	11	-0.02454758
9	-0.08070850	6	0.03906250	12	0.00896406
10	-0.24961996	7	-0.03021240	13	0.12625622
11	-0.08650172	8	-0.13285828	14	0.16070462
12	0.41219152	9	-0.09355831	15	-0.19870083
13	0.69643046	10	0.18216133	t_{11}	
14	0.03314883	11	0.44106736	11	0.00800896
15	-1.4674947	12	0.16840086	12	0.02318382
t_2		13	-0.74875764	13	-0.00596249
2	-0.12500000	14	-1.34708600	14	-0.12514982
3	-0.12500000	15	-0.12406771	15	-0.17663111
4	-0.01562500	t_6		t_{12}	
5	0.10156250	6	-0.02050781	12	-0.00700784
6	0.08593750	7	-0.03417969	13	-0.02202463
7	-0.08642578	8	0.02478790	14	0.00321460
8	-0.25237274	9	0.13085937	15	0.12395082
9	-0.13074875	10	0.10456268	t_{13}	
10	0.34451961	11	-0.19036049	13	0.00619924
11	0.73779087	12	-0.50204569	14	0.02102351
12	0.33147282	13	-0.20806881	15	-0.00067934
13	-0.99486640	14	0.90379496	t_{14}	
14	-1.98783536	15	1.68652741	14	-0.00553504
15	-0.70791841	t_7		15	-0.02014753
t_3		7	0.01611328	t_{15}	
3	0.06250000	8	0.03076172	15	0.00498153
4	0.06250000	9	-0.02009487	-	-

Tabelle 7.2.1: Koeffizienten der Dispersion der Spinleiter in 15. Ordnung.

7.2.2 Koeffizienten: Grundzustand der alternierende Spinleiter

Ordnung	SP-CUT	Ordnung	SP-CUT
0	-0.825	9	-0.11516891
1	0	10	0.06334061
2	-0.34090909	11	0.22967668
3	-0.15495868	12	0.16564719
4	0.01702198	13	-0.15351333
5	0.11952735	14	-0.42752221
6	0.09750809	15	-0.25354301
7	-0.02800412	16	0.38294840
8	-0.14184565		

Tabelle 7.2.2: Koeffizienten des Grundzustandsenergie der alternierenden Spinleiter für $J'_\perp = 1.2$.

7.2.3 Koeffizienten: Dispersion der alternierende Spinleiter

Für die alternierende Spinleiter sind die Koeffizienten t_d der einzelnen Matrixelemente der Matrix $\underline{\underline{M}}$, siehe Gleichung 5.2.2, angeben. d gibt hier wieder die Reichweite des Hüpfens an.

Ordnung	Koeffizienten	Ordnung	Koeffizienten
t_0		7	0.08115556
0	1	8	0.04273061
1	0	9	-0.08803878
2	0.68181818	10	-0.17065003
3	0.30991736	11	-0.04650305
4	-0.14261905	12	0.24143238
5	-0.41557085	13	0.37362081
6	-0.3092349	t_6	
7	0.15536931	6	-0.01398812
8	0.56447272	7	-0.02091311
9	0.42714378	8	0.01521149
10	-0.30571050	9	0.06817047
11	-0.95489311	10	0.04648122
12	-0.60166396	11	-0.08638434
13	0.82161561	12	-0.19572116
t_2		13	-0.06412749
2	-0.11363636	t_8	
3	-0.10330579	8	-0.00755457
4	-0.0122740	9	-0.01468727
5	0.06924276	10	0.00838267
6	0.05785942	11	0.05682685
7	-0.04090435	12	0.05022786
8	-0.12952772	13	-0.07779488
9	-0.07813024	t_{10}	
10	0.12460577	10	-0.00450284
11	0.28987133	11	-0.01079578
12	0.15944178	12	0.00409773
13	-0.27885442	13	0.04714879
t_4		t_{12}	
4	-0.03116138	12	-0.00285462
5	-0.03317747	13	-0.00814201
6	0.02548558	-	-

Tabelle 7.2.3: Koeffizienten des Matrixelements M_{11} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.

Ordnung	Koeffizienten	Ordnung	Koeffizienten
t_0		7	0.07210783
0	1.2	8	0.04437608
1	0	9	-0.07128815
2	0.68181818	10	-0.15393594
3	0.30991736	11	-0.05271784
4	-0.15986342	12	0.20728113
5	-0.43722511	13	0.34061615
6	-0.32459462	t_6	
7	0.15988661	6	-0.01184453
8	0.59149035	7	-0.01819031
9	0.4615016	8	0.01095480
10	-0.29283265	9	0.05621627
11	-0.98116281	10	0.04328735
12	-0.65043831	11	-0.06396735
13	0.79729874	12	-0.16328447
t_2		13	-0.07130687
2	-0.11363636	t_8	
3	-0.10330579	8	-0.00618286
4	-0.01120458	9	-0.01219007
5	0.06922755	10	0.00574076
6	0.04855859	11	0.04493297
7	-0.05704574	12	0.04326984
8	-0.13188402	13	-0.05499657
9	-0.04833601	t_{10}	
10	0.16808751	10	-0.00360404
11	0.29425793	11	-0.00869977
12	0.09654811	12	0.00260778
13	-0.35491362	13	0.03633844
t_4		t_{12}	
4	-0.02792639	12	-0.00224969
5	-0.03121078	13	-0.00643333
6	0.01949955	-	-

Tabelle 7.2.4: Koeffizienten des Matrixelements M_{22} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.

Ordnung	Koeffizienten	Ordnung	Koeffizienten
t_1		6	0.02443938
1	0.5	7	-0.01723325
2	0	8	-0.06882735
3	-0.10351967	9	-0.04418694
4	-0.11787954	10	0.07772144
5	-0.07018606	11	0.17211308
6	0.02853343	12	0.06173547
7	0.09328777	13	-0.23909940
8	0.06680455	t_7	
9	-0.03759727	7	0.00921603
10	-0.10854657	8	0.01599404
11	-0.03556142	9	-0.00957393
12	0.15043006	10	-0.05581397
13	0.23728904	11	-0.04574993
t_3		12	0.07034140
3	0.05175983	13	0.18566781
4	0.04715182	t_9	
5	-0.03205290	9	0.00519218
6	-0.09861260	10	0.01132456
7	-0.06343140	11	-0.00490073
8	0.06993628	12	-0.04569697
9	0.17332712	13	-0.04729919
10	0.09568796	t_{11}	
11	-0.15201914	11	0.00317279
12	-0.31908032	12	0.00834536
13	-0.11778655	13	-0.00201914
t_5		t_{13}	
5	0.01880795	13	0.00204486

Tabelle 7.2.5: Koeffizienten des Matricelements M_{12} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.

Abbildungsverzeichnis

2.2.1	Schematische Darstellung des Hamiltonoperators während des Flusses für den MKU-Generator. Der Generator erhält die Banddiagonalität des Starthamiltonoperators. Er führt auf einen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator.	10
2.2.2	Schematische Darstellung des $0n$ -Generators (a) und des $0n:1n$ -Generators (b). Beide Generatoren erhalten nicht die Blockbanddiagonalität. Der $0n$ -Generator entkoppelt den $(0,0)$ -Block, der $0n:1n$ -Generator zusätzlich noch den $(1,1)$ -Block. .	12
2.4.1	Darstellung des $(8,6,6,4,4)$ -Trunkierungsschemas. Die kleinen Rechtecke entsprechen dabei den verschiedenen Blöcken des Hamiltonoperators. Zum Beispiel erhält ein Term aus dem $(1,1)$ -Block die Reichweite $d_2 = 8$. Der $(0,0)$ -Block ist lokal und wird nicht trunkiert. Dies ist mit den ∞ -Symbol gekennzeichnet.	17
3.1.1	Schematische Darstellung der Spinleiter. Die roten Punkte stehen für die Spins mit $S = 1/2$. Die grüne Linie steht für die Sprossen- und die blaue für die Holmkopplung.	20
3.2.1	Schematische Darstellung der alternierenden Spinleiter. Die roten Punkte stehen für die Spins mit $S = 1/2$. Die grüne Linie steht für die Sprossen- und die blaue für die Holmenkopplung. Die Sprossenkopplung $\tilde{J}_\perp$ ist mit der schwarzen Linie gekennzeichnet. Die verwendete Elementarzelle ist durch das graue Rechteck gegeben.	24
4.1.1	Schematische Darstellung der Berechnung der Kommutatoren. Beginnend mit dem Kommutator $[\eta^{(1)}, H^{(0)}]$, der die Beiträge 1. Ordnung bestimmt, werden alle Ordnungen von $\partial_l H(l)$ iterativ bestimmt. In dieser Abbildung wird die 1. bis zur 5. Ordnung berechnet.	30

4.1.2	Schematische Darstellung der Berechnung des Flusses für die 2. Ordnung der Spinleiter. Teilabbildung (a) gibt den ersten Loop an. Dieser Loop berechnet alle Beiträge, die erster Ordnung sind. Hier werden keine neuen Terme erzeugt. Teilabbildung (b) gibt den ersten Kommutatorblock des zweiten Loops an. In dieser Berechnung werden neue Terme erzeugt, die in $H^{(2)}$ und $\eta^{(2)}$ hinzugefügt werden. Teilabbildung (c) gibt den zweiten Kommutatorblock des zweiten Loops an. Mit dieser Berechnung erhält man alle Beiträge, die 2. Ordnung sind.	33
4.3.1	Dargestellt sind die Anzahl der Repräsentanten als Funktion der Ordnung. Es sind die Daten für den MKU, den 0n und den 0n:1n-Generator aufgetragen.	42
4.3.2	Abgebildet sind in (a) Anzahlen der Repräsentanten und in (b) die Laufzeit der CUT in Sekunden für verschiedene Auswahlregeln. Dabei werden auch unterschiedlich genaue Auswahlregeln eines Typs verwendet. Diese werden in Kapitel 4.3.2 erläutert.	49
4.3.3	Beispiel zur verschärften Auswahlregel. Die roten Punkte stellen Vernichtungsoperatoren dar. Die Anzahl dieser Vernichtungsoperatoren ist $n(V) = 7$. Direkt benachbarte Punkte bilden ein Cluster. Die Cluster sind mit den geschweiften Klammern gekennzeichnet. Die k_i , mit denen man $k(V)$ berechnen kann, sind angegeben.	53
5.1.1	Ergebnisse der Berechnung des Grundzustands der Spinleiter mit Hilfe der perturbativen und direkten Auswertung in 17. Ordnung. Dabei sind die trunkierte Reihe sowie Padé-Extrapolationen abgebildet. Die rote Linie gibt die Ergebnisse der direkten Auswertung an.	63

5.1.2	Ergebnisse der Berechnung des Grundzustands der Spinleiter mit Hilfe der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen. Gerade Ordnungen sind mit durchgezogener und ungerade mit gestrichelter Linie gezeichnet. Die Ergebnisse konvergieren sehr gut mit steigender Ordnung.	64
5.1.3	Die berechnete ROD, nach Gleichung 2.5.1, für die x -Werte 0.5, 1.0, 1.5, 2, 2.5, 3.	65
5.1.4	Vergleich der Grundzustandsergebnisse verschiedener Methoden. Die direkte und perturbative Auswertung der EP-CUT in 17. Ordnung, die beste Padé-Extrapolation der perturbativen Auswertung, eine S-CUT-Berechnung [28] sowie eine DMRG-Berechnung [29].	67
5.1.5	Abweichungen der verschiedenen Methoden. Als Referenzwert ist das Ergebnis der DMRG-Rechnung [29] $E_{0,DMRG}/J_{\perp}$ gewählt. Diese Energie wird von den anderen Energien $E_{0,A}/J_{\perp}$ abgezogen, Für welche Methode das A steht, ist in der Legende angegeben.	68
5.1.6	Die Dispersion der perturbativen Auswertung. Die ersten vier Kurven sind die trunkierten Reihen. Ab $x = 0.8$ sind die trunkierten Reihen im Hilfsparameter p gezeigt.	70
5.1.7	Die Energielücke der perturbativen Auswertung und nach dlogPadé extrapoliert.	71
5.1.8	Die Dispersion für verschiedene Ordnungen mittels der direkten Auswertung für die Kopplungen $x = 0.5$ und $x = 1$	74
5.1.9	Abgeschätzte Korrelationslänge für verschiedene Ordnungen und x -Werte.	75
5.1.10	Die Energielücke der direkten Auswertung für verschiedene Ordnungen wird mit den extrapolierten DMRG-Daten [29] verglichen.	76
5.1.11	Dispersion der direkten Auswertung (Ordnung 15) für die x -Werte 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3. Zusätzlich ist für $x = 1$ und $x = 2$ die Resultate einer exakten Diagonalisierungsrechnung (ED) [18] dargestellt.	77

5.1.12	ROD der direkten Auswertung (Ordnung 15) für die x -Werte 1, 2, 3.	78
5.1.13	Die Dispersion für $x = 1.5$. Abgebildet sind die direkte Auswertung und die perturbative Auswertung als Reihe in p . Desweiteren eine Padé-Extrapolation der Reihe in p und die Dispersion einer S-CUT-Rechnung [35]. Basierend auf dieser S-CUT-Rechnung ist ebenfalls das 3-Teilchen-Kontinuum abgebildet [35].	79
5.1.14	Vergleich des Verhältnisses $\omega^{(3/2\pi)}/\omega(\pi)$ zwischen Experiment y_{exp} [27, 25] und direkter Auswertung in 15. Ordnung. $\tilde{y}_{exp}$ ist das Verhältnis mit herabgesetzter Energielücke. Der Schnittpunkt ergibt den gesuchten x -Wert.	81
5.1.15	Theoretische und experimentelle Triplondispersion für DIM-PY.	82
5.2.1	Grundzustandsenergie der alternierenden Spinleiter für die Kopplungen $J'_\perp=1, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5$. Abgebildet sind in schwarz die trunkierten Reihen, in rot diverse Padé-Extrapolationen ([12,4],[11,5],[10,6],[9,7],[8,8],[7,9],[4,12]) und in blau die direkt bestimmten Werte.	83
5.2.2	ROD der direkten Auswertung für $x = 1$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen.	85
5.2.3	Abgebildet ist die Grundzustandsenergie für $J'_\perp = 1.2$ der direkten Auswertung, der perturbativen Auswertung und einer S-CUT-Rechnung [28] mit den 0n-Generator und einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4). Es sind die trunkierte Reihe und die beste Padé-Extrapolation ([10,6]) abgebildet. Im Ausschnitt ist die Abweichung der direktern Auswertung relativ zur S-CUT [28] dargestellt.	86
5.2.4	Die trunkierten Reihen sowie dlogPadé-Extrapolationen von $\tilde{\Delta}(x)$ für verschiedene $J'_\perp$ -Kopplungen.	88
5.2.5	Dispersionen der perturbativen Auswertung für verschiedene x - und $J'_\perp$ -Werte.	89

5.2.6	ROD der direkten Auswertung für $x = 1$ und verschiedenen $J'_\perp$ -Kopplungen.	90
5.2.7	Dispersionen der direkten Auswertung für verschiedene x - und $J'_\perp$ -Werte.	91
5.2.8	Abgebildet ist die Dispersion für $x = 0.5$ und $J'_\perp = 1.2$, die aus verschiedenen Methoden berechnet wurde. Es sind die EP-CUT mit direkter und perturbativer Auswertung und eine S-CUT-Rechnung mit einer Trunkierung von (12,10,10,6,6,5,5,4,4) gewählt worden. Im Ausschnitt ist die Abweichung von direkter und S-CUT zur perturbativen Dispersion gezeigt. Zweig 1 entspricht dem unteren Zweig und Zweig 2 dem oberen.	92

Tabellenverzeichnis

4.1.1	Terme des effektiven Hamiltonoperators für die Spinleiter, die bei der EP-CUT Rechnung bis zur zweiten Ordnung erzeugt werden. Angegeben sind ein Index der Terme, die Operatoren $\hat{H}_i$ sowie deren Koeffizienten für $l = 0$ und $l = \infty$. Die Koeffizienten für $l = \infty$ sind die Störungsreihen aus der perturbativen Auswertung. Desweiteren ist die minimale Ordnung dieser Terme angegeben. Die aus der Omax-Iteration (4.3.1) ermittelten maximalen Ordnungen sind für die Grundzustandsenergie und Dispersion bzw. nur für Grundzustandsenergie angegeben. Die grau schraffierten Terme tragen nicht zur jeweiligen Größe bei, weil hier $O_{\max} < O_{\min}$ gilt.	32
4.1.2	Nicht verschwindende Beiträge des Differentialgleichungssystems der Spinleiter in zweiter Ordnung. Die schraffierten Flächen geben die Beiträge an, die für die Grundzustandsenergie und Dispersion (dunkelgrau) bzw. nur für die Grundzustandsenergie (hellgrau) <i>nicht</i> benötigt werden.	36
5.1.1	Vergleich der Koeffizienten des Grundzustands zwischen EP-CUT und P-CUT [23].	62
7.2.1	Koeffizienten der Dispersion der Spinleiter in 15. Ordnung. .	97
7.2.2	Koeffizienten des Grundzustandsenergie der alternierenden Spinleiter für $J'_\perp = 1.2$	98
7.2.3	Koeffizienten des Matrixelements M_{11} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.	99
7.2.4	Koeffizienten des Matrixelements M_{22} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.	100
7.2.5	Koeffizienten des Matrixelements M_{12} der Dispersion der alternierenden Spinleiter in 13. Ordnung.	101

Literaturverzeichnis

- [1] DAGOTTO, E. und T. M. RICE: *Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials*. Science, 271(5249):618–623, Feb 2002.
- [2] BARDEEN, J., L. N. COOPER und J. R. SCHRIEFFER: *Theory of Superconductivity*. Phys. Rev., 108(5):1175–1204, Dez 1957.
- [3] WEGNER, F.: *Flow-equations for Hamiltonians*. Annalen der Physik, 506:77–91, 1994.
- [4] GLAZEK, S. D. und K. G. WILSON: *Renormalization of Hamiltonians*. Phys. Rev. D, 48(12):5863–5872, Dez 1993.
- [5] GLAZEK, S. D. und K. G. WILSON: *Perturbative renormalization group for Hamiltonians*. Phys. Rev. D, 49(8):4214–4218, Apr 1994.
- [6] KEHREIN, S.: *The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems*. Springer, Berlin, 2007.
- [7] <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~statphys/floweq.html>.
- [8] KNETTER, C. und G. S. UHRIG: *Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $S = 1/2$ chain*. European Physical Journal B, 13:209–225, Januar 2000.
- [9] DUSUEL, S. und G. S. UHRIG: *The quartic oscillator: a non-perturbative study by continuous unitary transformations*. Journal of Physics A Mathematical General, 37:9275–9294, Oktober 2004.
- [10] JOHNSTON, D. C., M. TROYER, S. MIYAHARA, D. LIDSKY, K. UEDA, M. AZUMA, Z. HIROI, M. TAKANO, M. ISOBE, Y. UEDA, M. A. KOROTIN, V. I. ANISIMOV, A. V. MAHAJAN und L. L. MILLER: *Magnetic Susceptibilities of Spin-1/2 Antiferromagnetic Heisenberg Ladders and Applications to Ladder Oxide Compounds*. ArXiv Condensed Matter e-prints, Januar 2000. arXiv:cond-mat/0001147.

-
- [11] SCHMIDT, K. P. und G. S. UHRIG: *Spectral Properties of Magnetic Excitations in Cuprate Two-Leg Ladder Systems*. Modern Physics Letters B, 19:1179–1205, 2005.
- [12] MIELKE, A.: *Flow equations for band-matrices*. Euro. Phys. Jour. B, 5:605–611, 1998.
- [13] FISCHER, T., S. DUFFE und G. S. UHRIG: *Adapted continuous unitary transformation to treat systems with quasi-particles of finite lifetime*. New Journal of Physics, 12(3):033048–+, März 2010.
- [14] SCHMIDT, K. P. und G. S. UHRIG: *Excitations in One-Dimensional $S=1/2$ Quantum Antiferromagnets*. Physical Review Letters, 90(22):227204–+, Juni 2003.
- [15] SACHDEV, S. und R. N. BHATT: *Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets*. Phys. Rev. B, 41(13):9323–9329, Mai 1990.
- [16] REISCHL, A. A.: *Derivation of Effective Models using Self-Similar Continuous Unitary Transformations in Real Space*. Dissertation, Universität zu Köln, 2006.
- [17] NUNNER, T. S., P. BRUNE, T. KOPP, M. WINDT und M. GRÜNINGER: *Cyclic spin exchange in cuprate spin ladders*. Phys. Rev. B, 66(18):180404, Nov 2002.
- [18] BREHMER, S., H.-J. MIKESKA, M. MÜLLER, N. NAGAOSA und S. UCHIDA: *Effects of biquadratic exchange on the spectrum of elementary excitations in spin ladders*. Phys. Rev. B, 60(1):329–334, Jul 1999.
- [19] BARNES, T., E. DAGOTTO, J. RIERA und E. S. SWANSON: *Excitation spectrum of Heisenberg spin ladders*. Phys. Rev. B, 47(6):3196–3203, Feb 1993.
- [20] GREVEN, M., R. J. BIRGENEAU und U. J. WIESE: *Monte Carlo Study of Correlations in Quantum Spin Ladders*. Phys. Rev. Lett., 77(9):1865–1868, Aug 1996.

-
- [21] OITMAA, J., R. R. P. SINGH und W. ZHENG: *Quantum spin ladders at $T=0$ and at high temperatures studied by series expansions*. Phys. Rev. B, 54(2):1009–1018, Jul 1996.
- [22] ZHENG, W., V. KOTOV und J. OITMAA: *Two-chain spin ladder with frustrating second-neighbor interactions*. Phys. Rev. B, 57(18):11439–11445, Mai 1998.
- [23] KNETTER, C., K. P. SCHMIDT und G. S. UHRIG: *High order perturbation theory for spectral densities of multi-particle excitations: $\{S = (1)/(2)\}$ two-leg Heisenberg ladder*. European Physical Journal B, 36:525–544, Dezember 2003.
- [24] DUFFE, S.: *Effective Hamiltonians for Undoped and Hole-Doped Antiferromagnetic Spin-1/2 Ladders by Self-Similar Continuous Unitary Transformations in Real Space*. Dissertation, Technische Universität Dortmund, 2010.
- [25] SCHMIDIGER, D., S. MUEHLBAUER, S. N. GVASALIYA, T. YANKOVA und A. ZHELUDEV: *Long-lived magnons throughout the Brillouin zone of the strong-leg spin ladder $(C_7D_{10}N)_2CuBr_4$* . ArXiv e-prints, Mai 2011. arXiv:cond-mat/1105.4832.
- [26] HONG, T., Y. H. KIM, C. HOTTA, Y. TAKANO, G. TREMELLING, M. M. TURNBULL, C. P. LANDEE, H.-J. KANG, N. B. CHRISTENSEN, K. LEFMANN, K. P. SCHMIDT, G. S. UHRIG und C. BROHOLM: *Field-Induced Tomonaga-Luttinger Liquid Phase of a Two-Leg Spin-1/2 Ladder with Strong Leg Interactions*. Phys. Rev. Lett., 105(13):137207, Sep 2010.
- [27] SCHMIDIGER, D.: *Persönliche Mitteilung, 2011*.
- [28] DRESCHER, N. A.: *Persönliche Mitteilung, 2011*.
- [29] RAAS, C.: *Persönliche Mitteilung, 2011*.

-
- [30] ALBUQUERQUE, A.F., F. ALET, P. CORBOZ, P. DAYAL, A. FEIGUIN, S. FUCHS, L. GAMPER, E. GULL, S. GÜRTLER, A. HONECKER, R. IGARASHI, M. KÖRNER, A. KOZHEVNIKOV, A. LÄUCHLI, S.R. MANMANA, M. MATSUMOTO, I.P. McCULLOCH, F. MICHEL, R.M. NOACK, G. PAWLOWSKI, L. POLLET, T. PRUSCHKE, U. SCHOLLWÖCK, S. TODO, S. TREBST, M. TROYER, P. WERNER und S. WESSEL: *The ALPS project release 1.3: Open-source software for strongly correlated systems*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 310(2, Part 2):1187 – 1193, 2007.
- [31] BAUER, B, L D CARR, H G EVERTZ, A FEIGUIN, J FREIRE, S FUCHS, L GAMPER, J GUKELBERGER, E GULL, S GÜRTLER, A HEHN, R IGARASHI, S V ISAKOV, D KOOP, P N MA, P MATES, H MATSUO, O PARCOLLET, G PAWLOWSKI, J D PICON, L POLLET, E SANTOS, V W SCAROLA, U SCHOLLWÖCK, C SILVA, B SURER, S TODO, S TREBST, M TROYER, M L WALL, P WERNER und S WESSEL: *The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2011(05):P05001, 2011.
- [32] SCHMIDT, K. P., C. KNETTER und G. S. UHRIG: *Novel Extrapolation for Strong Coupling Expansions*. Acta Physica Polonica B, 34:1481–+, Februar 2003.
- [33] SCHMIDT, K. P.: *Spectral Properties of Quasi One-dimensional Quantum Antiferromagnets*. Dissertation, Universität zu Köln, 2004.
- [34] CLOIZEAUX, J. und J. J. PEARSON: *Spin-Wave Spectrum of the Antiferromagnetic Linear Chain*. Phys. Rev., 128(5):2131–2135, Dez 1962.
- [35] FISCHER, T.: *Persönliche Mitteilung, 2011*.
- [36] UHRIG, G. S. und N. A. DRESCHER: *Persönliche Mitteilung, 2011*.
- [37] OITMAA, J., C. HAMER und W. ZHENG: *Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models*. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

-
- [38] FISCHER, T.: *Beschreibung von Quantendimermodellen mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen*. Diplomarbeit, TU-Dortmund, 2007.
- [39] DRESCHER, N. A.: *Optimierte Basiswahl und Trunkierungsfehler bei kontinuierlichen unitären Transformationen am Beispiel der dimerisierten Spin-1/2-Kette*. Diplomarbeit, TU-Dortmund, 2009.
- [40] KNETTER, C.: *Störungstheorie mit Hilfe von Flußgleichungen angewendet auf dimerisierte Spinmodelle*. Diplomarbeit, Universität zu Köln, 1999.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Prof. Dr. Götz S. Uhrig für die Vergabe der Diplomarbeit und die sehr gute Betreuung während dieser bedanken. Herrn Prof. Dr. Frithjof Anders möchte ich für die Übernahme des Zweitgutachtens danken.

Ein besonderer Dank gebührt Nils Drescher, welcher mir einen großen Teil der Programmierarbeit (1. Teil der EP-CUT) abgenommen hat. Desweiteren möchte ich ihm fürs Korrekturlesen und den vielen hilfreichen Diskussionen danken.

Carsten Rass möchte ich für DMRG-Daten und für die Hilfe bei technischen Fragen und Tim Fischer für die S-CUT-Daten danken.

Bei der gesamten Arbeitsgruppe möchte ich mich für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken.

Meine Familie danke ich für die Unterstützung während meines Studiums. Meiner Freundin Dominique möchte ich für die Unterstützung, dem Korrekturlesen und der schönen Zeit abseits der Physik danken.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Arbeit eigenständig verfasst habe. Es wurden ausschließlich die angegebenen Quellen genutzt und Zitate kenntlich gemacht.

Holger Krull