Inhaltsverzeichnis

Kapitel 0

Einleitung

Quantenmechanische Spinsysteme dürfen zu den etabliertesten und gleichzeitig interessantesten Modellen der Festkörperphysik gezählt werden. Obwohl sie eine formale Einfachheit aufweisen, können sie eine große Zahl von Phänomenen wie Magnetismus, Phasenübergänge oder kritisches Verhalten beschreiben.
In der Regel werden Quantenspinmodelle auf einem Gitter definiert. Hierbei wird jedem Gitterplatz eine Spinvariable zugeordnet, die auf einem endlichdimensionalen Hilbertraum definiert ist. Die Dynamik des Gesamtsystems wird durch einen Hamiltonoperator festgelegt, der auf dem Tensorproduktraum dieser lokalen Hilberträume wirkt. Dabei beschränkt man sich meist auf solche Hamiltonoperatoren H, die sich als Summe von lokalen Operatoren h_i ausdrücken lassen, welche nur auf eine endliche Anzahl von benachbarten Gitterplätzen wirken

$$H = \sum_i h_i \ . \tag{1}$$

Im Prinzip lassen sich alle physikalischen Eigenschaften des jeweiligen Modells berechnen, wenn alle Eigenwerte und die dazugehörigen Eigenvektoren bekannt sind. Allerdings sind exakte Lösungen bislang nur in speziellen Fällen möglich, nämlich genau dann, wenn das Modell entweder durch den Bethe-Ansatz lösbar ist, oder falls es eine Transformation gibt, die das Modell auf ein nicht-wechselwirkendes System abbildet. Im allgemeinen muß also auf ein numerisches oder auf ein approximatives Verfahren ausgewichen werden.
Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, ein auf dem Konzept der kontinuierlichen unitären Transformation aufbauendes störungstheoretisches Verfahren vorzustellen (Teil I) und es auf niedrigdimensionale Spinsysteme anzuwenden (Teil II). Das Verfahren teilt sich in zwei voneinander getrennte Schritte auf. In Teil I wird der allgemein formulierbare erste Schritt hergeleitet. Generell

kann die unitäre Transformation zunächst so definiert werden, daß sie in vielen Fällen zu einer allmählichen Diagonalisierung des Problems führt. Im Abschnitt 1.1 wird der allgemeine Formalismus der kontinuierlichen Transformationen eingeführt und seine Verwandtschaft zu den Flußgleichungen erläutert. Darauf aufbauend wird sich in den Abschnitten 1.2–1.4 zeigen, daß sich Schritt I des perturbativen Ansatzes leicht als numerisches Verfahren implementieren und auf eine große Klasse von Problemen anwenden läßt. Dieses liefert Ergebnisse in Form einer exakten Störungsreihe, die wegen immer nur beschränkt vorhandener Computerkapazität bei einer bestimmten Ordnung abgebrochen werden muß. Wir wollen vorwegnehmen, daß es sich um einen störungstheoretischen Zugang auf der Ebene der Operatoren handelt. Das heißt, der ursprüngliche Hamiltonoperator wird auf einen effektiven Operator abgebildet, der in Form einer Potenzreihe vorliegt. Dabei ist es nicht erforderlich, die sonst oft mühselig zu bestimmenden Störzustände zu kennen. Die Methode wird also besonders in Systemen, die keine oder nur wenige Symmetrien aufweisen, erfolgreich eingesetzt werden können. In diesen ersten Abschnitten stützen wir uns im wesentlichen auf Arbeiten von Wegner [1] und Stein [2].
In Teil II der Arbeit wird gezeigt, wie der modellabhängige zweite Schritt des Verfahrens realisiert werden kann. Wir illustrieren das Vorgehen an einem ein- und an einem zweidimensionalen Spinsystem, die beide in der Form (1) vorliegen. Konkret wird in Kapitel 2 die antiferromagnetische, dimerisierte und frustrierte $S = 1/2$ Heisenbergkette beschrieben durch (j ist der Index der L Plätze auf der Kette)

$$H = J_0 \sum_{j=1}^{L} \left[(1 + (-1)^j \delta) \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \alpha_0 \mathbf{S}_{j-1} \mathbf{S}_{j+1} \right] \tag{2}$$

behandelt, wobei periodische Randbedingungen durch $L+1 \equiv 1$ realisiert werden. Den Limes der starken Dimerisierung ($\delta = 1$) als Ausgangspunkt für den störungstheoretischen Zugang nutzend werden die Grundzustandsenergie, die Energielücke und die Ein-Magnon-Dispersion in eine Potenzreihe entwickelt. Es wird gezeigt, wie das Verfahren symbolisch implementiert werden kann (Abschnitte 2.2–2.3), so daß die berechneten Ergebnisse die volle Abhängigkeit von den Ausgangsparametern enthalten. Dies ist eine der Stärken dieses Zugangs, von der vor allem in der zweiten Anwendung in Kapitel 3 erfolgreich Gebrauch gemacht werden wird. Dem Kapitel 2 beigefügt sind eine ausführliche Diskussion der Resultate und Vergleiche mit Ergebnissen, die durch andere konkurrierende Methoden erzielt worden sind (Abschnitt 2.4).
In der zweiten Anwendung bestimmen wir die Ein-Magnon-Dispersion eines zweidimensionalen Spinmodells für $CuGeO_3$ in der dimerisierten Phase [3].

Dabei können wir viele der in Kapitel 2 gewonnenen Einsichten wiederverwenden (Abschnitt 3.2). Das von den Modellparametern abhängige Ergebnis wird an experimentell bestimmte Punkte der magnetischen Dispersion in $CuGeO_3$ [4] angepaßt. Im Abschnitt 3.3 diskutieren wir den Anpassungsprozeß ausführlich und geben am Ende Intervalle für die Modellparameter an. Dabei wird sich zeigen, daß die Breite dieser Intervalle stark von den Unsicherheiten der Messung abhängt, und wir somit behaupten können, mit unserer Methode an die Grenzen der Auflösung des Experiments gestoßen zu sein.
Die beiden Anhänge A und B enthalten numerische Ergebnisse von in den Kapiteln 1 und 2 durchgeführten Berechnungen. Teilweise sind unsere Resultate jedoch so umfangreich, daß sie auf Anfragen hin nur auf elektronischem Weg zur Verfügung gestellt werden können.

Teil I

Modellunabhängige Betrachtungen

Kapitel 1

Formalismus der Flußgleichungen

In diesem ersten Kapitel wollen wir das auf Wegner [1] zurückgehende Konzept der kontinuierlichen unitären Transformationen vorstellen. Aus ihnen ergeben sich Flußgleichungen, mit deren Hilfe die Formulierung eines neuartigen zweistufigen störungstheoretischen Zugangs gelingt [2].
In Abschnitt 1.1 bemühen wir uns, ausgehend von herkömmlichen Diagonalisierungsmethoden eine allgemeine Darstellung der kontinuierlichen Transformationen zu entwickeln. Es werden zwei Beispiele besprochen.
Im Rest des Kapitels erläutern wir sowohl die Herleitung (Abschnitt 1.2) als auch die rechnergestützte Umsetzung (Abschnitt 1.4) der ersten modellunabhängigen Phase des störungstheoretischen Zugangs.

1.1 Kontinuierliche unitäre Transformationen

Die Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren ist ein häufig auftretendes Problem in der Berechnung von quantenmechanischen Systemen. Im folgenden soll eine Methode vorgestellt werden, mit der Hamiltonoperatoren im Prinzip beliebig nahe an die Diagonalgestalt bzw. Blockdiagonalgestalt gebracht werden können. Bisher übliche Verfahren zur Vereinfachung von Matrizen führen eine endliche Zahl von sukzessiv angewandten unitären Transformationen an einer Ausgangsmatrix A aus

$$\begin{aligned} A &= A_0 \to A_1 \to \ldots \to A_m \ , \\ A_i &= U_i A_{i-1} U_i^\dagger \quad i = 1, 2, \ldots m \ . \end{aligned} \tag{1.1}$$

Die Transformationen sind so zu wählen, daß eine einfacher gebaute Matrix B erreicht wird

$$B = A_m = UAU^\dagger, \qquad U := U_1 U_2 \dots U_m \;, \tag{1.2}$$

deren Eigenwerte λ_i und Eigenvektoren $\mathbf{v}_i$ leichter zu bestimmen sind als diejenigen von A. Da U unitär ist, sind die λ_i auch die Eigenwerte von A. Die Eigenvektoren von A sind gegeben durch $U^\dagger \mathbf{v}_i$.
Zum Beispiel verwendet das aus der Numerik bekannte Householder-Verfahren eine endliche Zahl unitärer Transformationen, um eine hermitesche Matrix in Tridiagonalgestalt zu überführen. Bei dem numerisch problematischeren Jacobi-Verfahren müssen im Prinzip unendlich viele unitäre Transformationen durchgeführt werden, um eine hermitesche Ausgangsmatrix zu diagonalisieren [5].
Wegner [1] schlug 1994 vor, diese Verfahren folgendermaßen zu erweitern. Anstatt der sukzessiven Anwendung von unitären Matrizen führt Wegner eine *kontinuierliche* unitäre Transformation an der betrachteten hermiteschen Matrix durch. Dies entspricht einer Abfolge unendlich vieler infinitesimaler Transformationen. Dabei faßt man den entsprechenden Hamiltonoperator H als Funktion eines reellen *Flußparameters* l auf

$$H \to H(l), \quad l \in R \;, \tag{1.3}$$

und vereinbart, daß $H(0)$ der Ausgangsoperator sein soll, den es zu vereinfachen gilt. Ferner führt man eine von l abhängige unitäre Transformation $U(l)$ ein, mit der in Analogie zu Gl. (1.2)

$$H(l) = U(l)H(0)U^\dagger(l) \tag{1.4}$$

gelten soll. Diese Gleichung, nach $H(0)$ umgeformt und in die entsprechende Gleichung für $H(l+dl)$ eingesetzt, liefert das Gegenstück zu Gl. (1.1)

$$H(l+dl) = U(l+dl)U^\dagger(l)H(l)U(l)U^\dagger(l+dl) \;. \tag{1.5}$$

Sei $\eta(l)$ der im allgemeinen ebenfalls von l abhängige infinitesimale antihermitesche Erzeuger von $U(l)$, also

$$\frac{dU(l)}{dl} = \eta(l)U(l) \;. \tag{1.6}$$

In erster Ordnung gilt dann

$$\begin{aligned} U(l+dl) &= U(l) + \eta(l)U(l)dl \\ \Rightarrow U(l+dl)U^\dagger(l) &= \mathbf{1} + \eta(l)dl \\ \Rightarrow U(l)U^\dagger(l+dl) &= \mathbf{1} - \eta(l)dl \;, \end{aligned} \tag{1.7}$$

wobei im letzten Schritt die Antihermitezität von $\eta(l)$ benutzt wurde. Mit diesen Ersetzungen wird aus der Transformationsgleichung (1.5) in erster Ordnung in dl

$$\begin{aligned} H(l+dl) &= \big(\mathbf{1}+\eta(l)dl\big)H(l)\big(\mathbf{1}-\eta(l)dl\big) \\ &= H(l)+[\eta(l),H(l)]dl\ , \end{aligned} \tag{1.8}$$

was gleichbedeutend ist mit der sogenannten *Flußgleichung*

$$\boxed{\frac{dH(l)}{dl}=[\eta(l),H(l)]}\ . \tag{1.9}$$

Die Anfangsbedingung der Flußgleichung ist durch die oben erwähnte Vereinbarung, daß $H(0)$ der Ausgangsoperator sein soll, festgelegt.
Es ist nun entscheidend, einen Erzeuger $\eta(l)$ zu finden, der im Laufe der kontinuierlichen Transformation zu einer allmählichen Diagonalisierung von $H(l)$ führt. Es sei

$$H=\begin{pmatrix} \epsilon_1 & h_{12} & h_{13} & \cdots \\ h_{21} & \epsilon_2 & h_{23} & \cdots \\ h_{31} & h_{32} & \epsilon_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\ , \tag{1.10}$$

wobei eine $l-$Abhängigkeit von H bedeutet, daß jedes Matrixelement von l abhängig ist. Sei H^d der diagonale Anteil von H. Wegner zeigte [1], daß der Erzeuger

$$\eta(l)=[H^d(l),H(l)] \tag{1.11}$$

das Gewünschte leistet, wobei von jetzt an im allgemeinen auf eine explizite Angabe der $l-$Abhängigkeit verzichtet wird. Mit $\eta=(\eta_{i,j})$ kann Gl. (1.11) geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \eta_{i,j} &= \sum_k \epsilon_i\delta_{i,k}h_{k,j}-\sum_k h_{i,k}\epsilon_k\delta_{k,j} \\ &= (\epsilon_i-\epsilon_j)h_{i,j}\ . \end{aligned} \tag{1.12}$$

Dieses Ergebnis setzt man in der Flußgleichung (1.9) ein ($\epsilon_i=h_{ii}$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_{i,j}}{\partial l} &= \sum_k \eta_{i,k}h_{k,j}-\sum_k h_{i,k}\eta_{k,j} \\ &= \sum_k(\epsilon_i+\epsilon_j-2\epsilon_k)h_{i,k}h_{k,j}\ . \end{aligned} \tag{1.13}$$

Um zu zeigen, daß der gewählte Erzeuger tatsächlich zu einer Diagonalgestalt führt, berechnet man zunächst, wie sich die Quadrate der Diagonalelemente im Laufe der Transformation verhalten. Dazu betrachtet man die transformationsinvariante Spur von H^2

$$\begin{aligned} \mathrm{Sp} H^2(l) &= \text{konst.} \\ \Rightarrow \frac{\partial \mathrm{Sp} H^2(l)}{\partial l} &= 0 \ . \end{aligned} \tag{1.14}$$

Außerdem gilt

$$\mathrm{Sp} H^2 = \sum_{k,i} h_{k,i} h_{i,k} = \sum_k \epsilon_k^2 + \sum_{k,i \neq k} h_{k,i} h_{i,k} \ , \tag{1.15}$$

und zusammen mit Gl. (1.14) folgt

$$\sum_k \frac{\partial \epsilon_k^2}{\partial l} = - \sum_{k,i \neq k} \frac{\partial}{\partial l} (h_{k,i} h_{i,k}) \ . \tag{1.16}$$

Als letzten Schritt berechnet man noch

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\partial \epsilon_k^2}{\partial l} &= 2 \sum_k \epsilon_k \frac{\partial \epsilon_k}{\partial l} \\ &\overset{\text{Gl. (1.13)}}{=} 2 \sum_k \left(\epsilon_k \cdot 2 \sum_i (\epsilon_k - \epsilon_i) h_{k,i} h_{i,k} \right) \ . \end{aligned} \tag{1.17}$$

Nachdem man die Doppelsumme auf der rechten Seite umsortiert hat, setzt man Gl. (1.17) in Gl. (1.16) ein und erhält schließlich

$$- \sum_{k,i \neq k} \frac{\partial}{\partial l} (h_{k,i} h_{i,k}) = 2 \sum_{k,i} (\epsilon_k - \epsilon_i)^2 h_{k,i} h_{i,k} \ . \tag{1.18}$$

Da der Ausgangsoperator $H(0)$ hermitesch angenommen wurde, und diese Eigenschaft invariant unter unitären Transformationen ist, enthält Gl. (1.18) positiv definite Betragsquadrate $h_{i,j} h_{j,i}$. Die Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente von $H(l)$ werden mit wachsendem l also solange kleiner, wie die rechte Seite von (1.18) größer als Null ist. Sobald alle Nichtdiagonalelemente, die Zustände mit *ungleichen* Diagonalelementen verbinden, verschwunden sind, kommt es zu keiner weiteren Veränderung mehr. Das bedeutet, daß Nichtdiagonalelemente, die Zustände mit *gleichen* Diagonalelementen verbinden, nicht unbedingt verschwinden. Der Limes $l \to \infty$ führt also im allgemeinen zu einer Blockdiagonalisierung. Allerdings kann an Gl. (1.12) abgelesen werden, daß die den verbleibenden Nichtdiagonalelementen entsprechenden Matrixelemente von η verschwinden, so daß insgesamt

$$\lim_{l\to\infty} \eta(l) = \lim_{l\to\infty} [H^d(l), H(l)] = 0 \tag{1.19}$$

gilt. Im betrachteten Limes vertauscht der Operator also mit seinem Diagonalteil. Der Operator $H(\infty)$ ist jedoch nur bis auf die eben diskutierten Entartungen diagonal.
Die von Wegner vorgeschlagene Wahl des Erzeugers (1.11) hat eine weitere, unter Umständen nachteilige Eigenschaft. Hat der Ausgangsoperator bereits eine einfache banddiagonale Form, so wird diese im Laufe der Transformation verloren gehen. Um dies zu erläutern, betrachte man einen banddiagonalen Hamiltonoperator $H = (h_{i,j})$ mit

$$h_{i,j}(l = 0) = 0 \ , \text{ falls } |i - j| > M \ . \tag{1.20}$$

Gl. (1.13) läßt nun erkennen, daß diese Struktur im allgemeinen nicht beibehalten wird. Der Erzeuger (1.11) führt im Verlauf der Transformation zu einer Erhöhung der Anzahl der zu berücksichtigenden Matrixelemente, was in konkreten Berechnungen zu numerischen Schwierigkeiten führen kann. Die Zahl der zu verwaltenden Einträge kann so groß werden, daß die Methode unbrauchbar wird.
Es soll nun ein weiterer Erzeuger diskutiert werden, bei dem die genannten Schwierigkeiten nicht auftreten, falls der Ausgangsoperator gewisse Voraussetzungen erfüllt. Mielke [6] schlägt den folgenden infinitesimalen Erzeuger vor (H hermitesch, $H = (h_{i,j})$, $l-$Abhängigkeiten implizit vorausgesetzt)

$$\eta_{i,j} = -\eta_{j,i} = \text{sgn}(i - j) h_{i,j}, \ \ \eta_{i,i} = 0 \ . \tag{1.21}$$

Mit diesem wird aus der Flußgleichung (1.9)

$$\frac{\partial h_{i,j}}{\partial l} = -\text{sgn}(i - j)(h_{i,i} - h_{j,j}) h_{i,j} + \sum_{k \neq i,j} (\text{sgn}(i - k) + \text{sgn}(j - k)) h_{i,k} h_{k,j} \ . \tag{1.22}$$

Wegen der Summe der Signumfunktionen verschwindet der zweite Term, falls $|i - j| > M$. Das zeigt, daß dieser neue Erzeuger die im Ausgangsoperator vorhandene Bandstruktur erhält. Die wichtigste Frage ist nun, ob dieser Erzeuger zu einer Diagonalisierung führt. Dazu betrachte man die Entwicklung der Diagonalelemente im Fluß der Transformation

$$\frac{\partial h_{i,i}}{\partial l} = 2 \sum_{k \neq i} \text{sgn}(i - k) h_{i,k} h_{k,i} \ . \tag{1.23}$$

Mielke zeigt die diagonalisierende Eigenschaft für den Fall einer endlichdimensionalen Matrix $(h_{i,j})$, $1 \leq i, j \leq N$ und für den semi-unendlichdimensionalen Fall $1 \leq i, j$. Für die Summe der ersten r (r beliebig, aber fest) Diagonalelemente erhält man nach Gl. (1.23)

$$\frac{\partial}{\partial l} \sum_{i=1}^{r} h_{i,i} = -2 \sum_{i=1}^{r} \sum_{k>r} h_{i,k} h_{k,i} < 0 \ . \tag{1.24}$$

Diese Größe nimmt also als Funktion von l mit zunehmendem l ab. Nimmt man nun an, daß H von unten beschränkt ist, so ist $\sum_{i=1}^{r} h_{i,i}$ ebenfalls von unten beschränkt und zwar durch die Summe der kleinsten r Eigenwerte von H. Daraus folgt, daß die Ableitung dieser Größe im Limes $l \to \infty$ verschwinden muß. Da r beliebig gewählt werden kann, impliziert dies

$$\lim_{l \to \infty} h_{i,k} h_{k,i} = 0, \quad \text{für } i \neq k \ . \tag{1.25}$$

Für $l \to \infty$ erreicht man also Diagonalgestalt. Eine weitere Konsequenz aus Gl. (1.25) ist, daß wegen Gl. (1.22) $\mathrm{sgn}(i-j)(h_{i,i} - h_{j,j}) > 0$ für genügend großes l gelten muß. Das heißt, daß die diagonalen Matrixelemente für große l der Größe nach geordnet sind.
Es sei noch auf eine letzte Eigenschaft hingewiesen. Da die Diagonalelemente ab einem genügend großen l in ihrer endgültigen Form angeordnet sind, werden sie für noch größeres l nicht weiter vertauscht. Mit der Flußgleichung (1.22) zusammen kann man somit das asymptotische Verhalten der $h_{i,j}$ für große l als $\propto \exp(-|h_{i,i}(\infty) - h_{j,j}(\infty)| l)$ angeben. Der zweite Term in Gl. (1.22) fällt schneller ab, so daß die Asymptotik allein durch den ersten Term bestimmt wird. Asymptotisch fallen nicht diagonale Elemente um so schneller ab, je größer die Differenz der entsprechenden diagonalen Elemente ist. Liegt eine Entartung vor (diese kann unter Umständen erst im Laufe der Transformation auftreten), kann die Asymptotik nicht mehr leicht angegeben werden. In diesem Fall werden die nicht diagonalen Elemente im allgemeinen deutlich langsamer konvergieren.
Im Gegensatz zu Wegners Erzeuger wird hier eine vollständige Diagonalisierung erreicht, auch im Falle von vorhandenen Entartungen. Außerdem läßt sich das asymptotische Verhalten der Matrixelemente im Laufe der Transformation leichter bestimmen als bei Wegners Erzeuger. Zusammenfassend läßt sich feststellen:

(i) $H(\infty)$ ist diagonal, sogar dann, wenn Entartungen im Ausgangsproblem enthalten sind.

(ii) Eine Bandmatrix behält während der Transformation ihre Struktur bei.

(iii) $h_{i,i}(\infty) \geq h_{j,j}(\infty)$ für $i > j$.

(iv) Das asymptotische Verhalten für große l ist bekannt:
$h_{i,j} \propto \exp(-|h_{i,i}(\infty) - h_{j,j}(\infty)|l)$.

Damit ist die Diskussion der grundlegenden Ideen der kontinuierlichen unitären Transformationen abgeschlossen. Abschließend sei betont, daß das Problem der Diagonalisierung hier auf das Auffinden eines geeigneten infinitesimalen Erzeugers umgewälzt wird. Es wird kein Universalwerkzeug in die Hand gegeben. Vielmehr muß das Konzept einer gewünschten Klasse von Problemen angepaßt werden. So werden wir im nächsten Abschnitt 1.2 eine Anpassung an eine Klasse von quantenmechanischen Problemen, die eine störungstheoretische Darstellung erlauben, darlegen.

1.2 Flußgleichungen in der Störungsrechnung

Die Störungstheorie ist eines der wichtigsten und anpassungsfähigsten Werkzeuge für nicht exakt lösbare Probleme. Es wurden zahlreiche Methoden entwickelt und untersucht, um die unterschiedlichsten Situationen behandeln zu können. Die sich gerade in den letzten Jahren vollziehende beeindruckende Steigerung der Rechnerkapazitäten macht es zu einer interessanten Aufgabe, numerische Störungsverfahren zu untersuchen. Auf dem Konzept der kontinuierlichen, unitären Transformationen des letzten Abschnitts 1.1 aufbauend, möchten wir hier eine Perturbationsmethode vorstellen, die sich auf eine natürliche Art und Weise in zwei getrennt voneinander behandelbare Schritte aufteilen läßt. Es wird sich zeigen, daß die Flußgleichungen zu einem überschaubaren und sehr systematischen Formalismus führen, der es erlaubt, beide Schritte leicht zu implementieren. Dabei werden die von Stein 1997 entwickelten, grundlegenden Ideen zu diesem Verfahren [2] aufgegriffen und erweitert. In diesem Abschnitt soll der erste der beiden erwähnten Schritte diskutiert werden. Dabei geht es zunächst darum, den Ausgangshamiltonian (siehe 1.26) durch eine kontinuierliche, unitäre Transformation auf einen einfacheren Operator H_{eff} abzubilden. Es wird sich zeigen, daß sich dieses Problem auf das Lösen von gekoppelten, rekursiven Differentialgleichungen zurückführen läßt. In Abschnitt 1.4 wird dann gezeigt, wie sich Schritt I implementieren läßt, das heißt, wie man die Differentialgleichungen rechnergestützt löst. Während Schritt I allgemein, also ohne Bezugnahme auf ein bestimmtes Modell, entwickelt werden kann, ist Schritt II von modellspezifischer Natur. In ihm wertet man den in Schritt I gewonnenen effektiven Operator aus, indem man seine Wirkung auf verschiedene Zustände des betrachteten Modells berechnet. Auf welche Weise dies konkret verwirklicht wird, soll in den jeweiligen Modellabschnitten des zweiten Teils der vorliegenden Arbeit genauer dargestellt werden. Das betrachtete System erlaube einen störungstheoretischen Ansatz der Form

$$H = H_0 + \lambda H_\mathrm{S} \ , \tag{1.26}$$

wobei $\lambda < 1$ der als klein angenommene Störparameter sei. Der Fall $\lambda = 0$ sei bereits gelöst. Das heißt, H_0 liege in Diagonalgestalt vor und $\{|\nu_i\rangle\}$ sei das System der Eigenzustände von H_0. Um Schritt I formulieren zu können, stellen wir zwei Bedingungen an das System:

(A) Der ungestörte Hamiltonoperator habe ein von unten beschränktes äquidistantes Spektrum. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir an, daß die eventuell entarteten Eigenzustände E_i nummeriert werden können: $E_i = i$ und $i \in \{0, 1, 2, 3, \ldots\}$ ist; i ist die Anzahl der Energiequanten im System. Sei ferner $U_i \subset \{|\nu_i\rangle\}$ der entsprechende Zustandsunterraum zu E_i.

(B) Der Störoperator H_S verbinde Zustände aus dem Unterraum U_i mit Zuständen aus U_j nur dann, wenn $|i - j| < N$, wobei N eine positive ganze Zahl ist. Mit anderen Worten: H_S soll sich in der Form $H_\mathrm{S} = \sum_{n=-N}^{N} T_n$ schreiben lassen. Dabei ist T_n ein Operator, der die Anzahl der Energiequanten um n erhöht (verringert, falls $n < 0$), also

$$[H_0, T_n] = nT_n \ . \tag{1.27}$$

Mit den getroffenen Vereinbarungen kann man Gl. (1.26) umschreiben zu

$$H = H_0 + \lambda \sum_{n=-N}^{N} T_n \ . \tag{1.28}$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß der Störanteil λH_S als klein gegenüber H_0 angesehen wird. Die Störung soll das Spektrum von H nicht qualitativ verändern, insbesondere soll die Energielücke nicht verschwinden. Ferner soll das Spektrum von unten beschränkt bleiben. Auf diese letzte Forderung wird weiter unten noch einmal zurückgegriffen.

Die Bedingungen (A) und (B) zwingen dem Problem eine banddiagonale Struktur auf. Dennoch lassen sie eine immer noch große Klasse von Problemen zu, die durch das hier zu beschreibende Verfahren angegangen werden können. Abb. 1.1 soll die durch (A) und (B) festgelegte Struktur, die H in $\{|\nu_i\rangle\}$ für den Fall N=2 annimmt, schematisch darstellen (linker Teil der Abbildung). Dabei

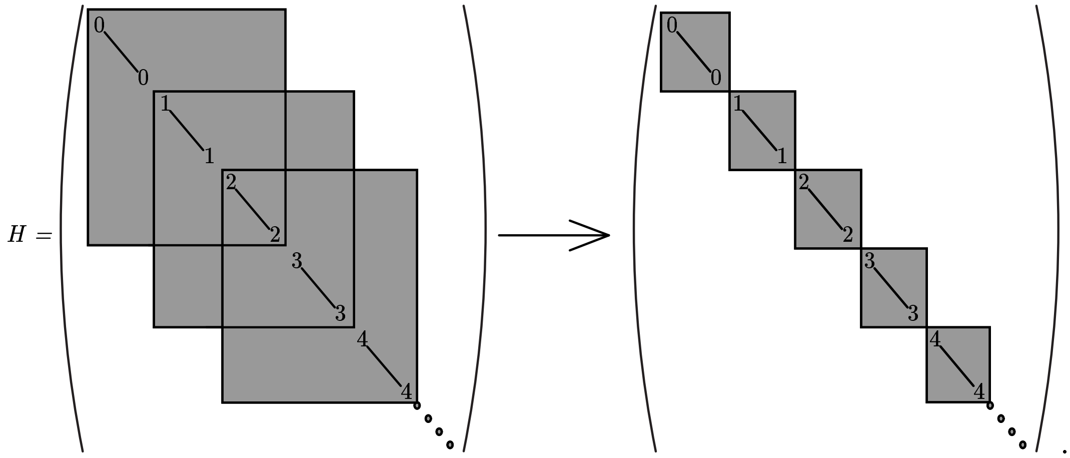

Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der durch (A) und (B) erzwungenen banddiagonalen Struktur des Ausgangshamiltonoperators und der blockdiagonalisierenden Wirkung der Transformation. Weitere Erläuterungen finden sich im Text.

kann H_S Einträge in den schraffierten Bereichen haben. Auf der Hauptdiagonalen finden sich die Eigenwerte von H_0 wieder (Anzahl der Energiequanten im System), deren eventuelle Entartung durch diagonale Striche angedeutet ist.

Das störungstheoretische Problem (1.26) wird in der Regel dadurch angegangen, daß man Eigenwerte und Eigenzustände von H als Potenzreihen in λ ansetzt. Um die Eigenwerte in n-ter Ordnung angeben zu können, müssen die Eigenzustände bis zur $(n-1)$-ten Ordnung bekannt sein. Das Erreichen hoher Ordnungen durch einen solchen Ansatz scheitert meist an der rasch zunehmenden Komplexität der Eigenzustandsberechnungen.

Der Ansatz, der hier verfolgt werden soll, umgeht das Problem der Eigenzustandsberechnung. Durch Anwendung einer kontinuierlichen unitären Transformation soll eine Vereinfachung des Problems direkt auf der Ebene der Operatoren erreicht werden. Konkret wird die Transformation des Hamiltonoperators H auf einen effektiven Operator H_{eff} führen, der in einer Potenzreihe in λ angegeben werden kann. Es handelt sich also nach wie vor um eine perturbative Methode. Außerdem soll die Transformation das gestörte System H auf das ungestörte System H_0 abbilden, so daß

$$[H_{\text{eff}}, H_0] = 0 \tag{1.29}$$

gilt. Das bedeutet, daß die Anzahl der Energiequanten eine Erhaltungsgröße von H_{eff} ist. Das vereinfachte System, das heißt H_{eff}, wird dann im weiter oben erwähnten modellabhängigen zweiten Schritt ausgewertet.

Wie wir zu Beginn des letzten Abschnitts 1.1 erläutert haben, ist es zunächst notwendig, den Hamiltonoperator geeignet zu parametrisieren $H \to H(l)$. Für $l = 0$ soll der Ausgangsoperator vorliegen

$$H(0) = H_0 + \lambda H_{\mathrm{S}} \; . \tag{1.30}$$

Die Transformation soll nur auf den Störanteil H_{S} wirken und H_0 unverändert lassen

$$H(l) = H_0 + \lambda H_{\mathrm{S}}(l) \; . \tag{1.31}$$

In der Eigenzustandsbasis von H_0, $\{|\nu_i\rangle\}$, sollen folgende Matrixdarstellungen gelten: $H(l) = (h_{i,j}(l))$, $H_0 = (h_i^0 \delta_{i,j})$ und $\eta(l) = (\eta_{i,j}(l))$. Mit diesen Bezeichnungen führen wir nun den antihermiteschen infinitesimalen Erzeuger

$$\eta_{i,j} = \mathrm{sgn}(h_i^0 - h_j^0) h_{i,j} \tag{1.32}$$

ein, der, wie wir im folgenden zeigen werden, im Limes $l \to \infty$ das geforderte Verschwinden des Kommutators (1.29) bewirkt. Dieser Erzeuger stellt eine Art Hybrid der beiden im letzten Abschnitt 1.1 vorgestellten Erzeuger dar. Analog zu den Rechnungen des letzten Abschnitts 1.1 für Mielkes Erzeuger rechnet man durch Einsetzen in die Flußgleichung nach, daß

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_{i,j}}{\partial l} &= -\mathrm{sgn}(h_i^0 - h_j^0)(h_{i,i} - h_{j,j}) h_{i,j} \\ &+ \sum_{k \neq i,j} (\mathrm{sgn}(h_i^0 - h_k^0) + \mathrm{sgn}(h_j^0 - h_k^0)) h_{i,k} h_{k,j} \; , \end{aligned} \tag{1.33}$$

und zeigt die diagonalisierende Eigenschaft, indem man die Ableitung der Summe der ersten r (r beliebig, aber fest) Diagonalelemente betrachtet

$$\frac{\partial}{\partial l} \sum_{i=1}^{r} h_{i,i} = 2 \sum_{i=1}^{r} \sum_{k>r} \mathrm{sgn}(h_i^0 - h_k^0) h_{i,k} h_{k,i} \; . \tag{1.34}$$

Da H_0 in Diagonalgestalt vorliegt und nicht von l abhängt, gelingt es immer, die Eigenzustände $\{|\nu_i\rangle\}$ so anzuordnen, daß für alle l gilt: $h_k^0 \geq h_i^0$, falls $k > i$. Somit ist die rechte Seite von Gl. (1.34) kleiner oder gleich Null. An dieser Stelle beachte man, daß $h_{i,k} = h_{k,i}^*$, da $H(l)$ hermitesch ist. Da wir ferner angenommen haben, daß H auch bei vorhandenem Störterm ein von unten beschränktes Spektrum hat, ist auch $\sum_{i=1}^{r} h_{i,i}$ von unten beschränkt[1].

[1] An dieser Stelle ist noch einmal darauf hinzuweisen, daß der Störterm als klein angenommen wird. Die Diagonalelemente $h_{i,i}$ werden sich im Laufe der Transformation also nur quantitativ ändern. (Siehe auch Gl. (1.33).) Wenn der Hamiltonoperator eine endlichdimensionale Matrix ist, was in numerischen Betrachtungen sowieso der Fall sein wird, ist die Beschränktheit von unten in jedem Fall gegeben.

Die Ableitung dieser Größe muß also für $l \to \infty$ verschwinden. Das heißt, daß alle Nichtdiagonalelemente, die Zustände mit *ungleichen* Diagonalelementen verbinden, verschwinden werden. Nichtdiagonalelemente, die Zustände mit *gleichen* Diagonalelementen verbinden, verschwinden im allgemeinen nicht, so daß es zu einer Blockdiagonalisierung kommt. Wegen der gewählten Form gilt aber in jedem Fall

$$\lim_{l\to\infty} \eta_{i,j}(l) = \lim_{l\to\infty} \mathrm{sgn}(h_i^0 - h_j^0) h_{i,j}(l) = 0 \tag{1.35}$$

$$\Rightarrow \qquad \lim_{l\to\infty} (h_i^0 - h_j^0) h_{i,j}(l) = 0 \; . \tag{1.36}$$

In Abb. 1.1 ist die blockdiagonalisierende Wirkung der Transformation schematisch dargestellt. Die letzte Gleichung ist gleichbedeutend mit

$$\lim_{l\to\infty} [H_0, H(l)] \overset{\text{Gl. (1.31)}}{=} \lim_{l\to\infty} [H_0, H_\mathrm{S}(l)] = 0 \; . \tag{1.37}$$

Der gewählte Erzeuger η in Gl. (1.32) führt also zum Verschwinden des Kommutators (1.29). Die Einführung des Signums sorgt dafür, daß die durch (A) und (B) sichergestellte einfache Struktur des Ausgangsoperators im Laufe der Transformation erhalten bleibt, wie es am Ende des letzten Abschnitts 1.1 für Mielkes Erzeuger diskutiert wurde. Der zu berücksichtigende Hilbertraum bleibt überschaubar, was in der konkreten Berechnung von Vorteil sein wird.
Mit dem Erzeuger (1.32) ist offensichtlich eine geeignete Wahl getroffen worden. Auf den folgenden Seiten soll mit seiner Hilfe das angekündigte systematische Perturbationsverfahren hergeleitet werden. Dabei werden wir uns ohne Verlust der Allgemeingültigkeit auf den Fall $N = 2$ beschränken, um die Notation möglichst einfach zu halten.
Die Parametrisierung des Hamiltonoperators durch Gl. (1.31) war bisher rein formal:

$$H(l) = H_0 + \lambda H_\mathrm{S}(l) \; .$$

Es wird nun ein konkreter $l-$abhängiger Ansatz für $H(l)$, das heißt für $H_\mathrm{S}(l)$ gemacht. Der allgemeinste Ansatz, den man für $H_\mathrm{S}(l)$ machen kann, ist

$$H_\mathrm{S}(l) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^{k-1} \sum_{|\underline{m}|=k} F(l;\underline{m}) T(\underline{m}) \; . \tag{1.38}$$

Dabei sind die $F(l;\underline{m})$ reellwertige zunächst unbekannte Funktionen, für die weiter unten rekursive Differentialgleichungen hergeleitet werden. Die Bedeutungen der anderen Symbole sind

$$\begin{aligned} \underline{m} &= (m_1, m_2, m_3, \dots, m_k) \quad \text{mit} \\ m_i &\in \{0, \pm 1, \pm 2\} \\ |\underline{m}| &= k \\ T(\underline{m}) &= T_{m_1} T_{m_2} T_{m_3} \dots T_{m_k} \\ M(\underline{m}) &= \sum_{i=1}^{k} m_i \ . \end{aligned} \tag{1.39}$$

An dieser Stelle sei angemerkt, daß sich Gl. (1.27) leicht erweitern läßt zu

$$[H_0, T(\underline{m})] = M(\underline{m}) T(\underline{m}) \ . \tag{1.40}$$

Der Ansatz (1.38) ist im Prinzip eine Summe über alle möglichen $k-$Tupel $(\underline{m})$ und somit die Summe aller möglichen Produkte $T(\underline{m})$ der Auf- und Absteige-operatoren T_n, wie sie in (B) eingeführt worden sind. Wie weiter oben gezeigt wurde, erhält der hier gewählte Erzeuger die Struktur des Ausgangsproblems, das heißt, $H_{\mathrm{S}}(l)$ wird für jedes l nur solche Unterräume U_i und U_j verbinden, für die $|i-j| \leq 2$ gilt. Genaugenommen ist der Ansatz (1.38) also zu allgemein. Weiter unten wird man sehen, wie der Erzeuger (1.32) die Erhaltung der Struktur über die $F(l;\underline{m})$ steuert.
In der Basis $\{|\nu_i\rangle\}$ gelten die Matrixdarstellungen $H_{\mathrm{S}}(l) = (h^S_{i,j}(l))$ und $T(\underline{m}) = (t_{i,j}(\underline{m}))$. Mit dem gewählten Ansatz für $H_{\mathrm{S}}(l)$ wird aus dem Erzeuger (1.32)

$$\begin{aligned} \eta_{i,j}(l) &= \mathrm{sgn}(h^0_i - h^0_j)(h^0_i \delta_{i,j} + \lambda h^S_{i,j}(l)) \\ &= \lambda \cdot \mathrm{sgn}(h^0_i - h^0_j) h^S_{i,j}(l) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(l;\underline{m}) \mathrm{sgn}(h^0_i - h^0_j) t_{i,j}(\underline{m}) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(l;\underline{m}) \mathrm{sgn}(M(\underline{m})) t_{i,j}(\underline{m}) \ . \end{aligned} \tag{1.41}$$

Das letzte Gleichheitszeichen folgt aus der Tatsache, daß die $t_{i,j}(\underline{m}) = \langle i|T(\underline{m})|j\rangle$, $|i\rangle, |j\rangle \in \{|\nu_i\rangle\}$, nur dann ungleich Null sind, wenn $|i\rangle \in U_n$, $|j\rangle \in U_m$ und $|n-m| = M(\underline{m})$ gilt. Denn $T(\underline{m})$ verbindet nach Definition (1.39) nur solche Unterräume, die eine Differenz von $M(\underline{m})$ Energiequanten aufweisen. Das

Diagonalelement $h_i^0 = \langle i|H_0|i\rangle$ ist gleich der Anzahl der im Zustand $|i\rangle$ enthaltenen Energiequanten, womit $h_i^0 - h_j^0$ dann die Differenz $M(\underline{m})$ ist[2]. Man erhält also

$$\eta(l) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(l;\underline{m})\mathrm{sgn}(M(\underline{m}))T(\underline{m}) \ . \tag{1.42}$$

Die Ansätze (1.38) und (1.42) werden nun in die Flußgleichung $dH(l)/dl = [\eta(l), H(l)]$ eingesetzt, und man erhält

$$\begin{aligned}
\lambda\frac{dH_{\mathrm{S}}(l)}{dl} = \lambda[\eta(l), H_{\mathrm{S}}(l)] \quad &- \quad \sum_{k=1}^{\infty}\lambda^k \sum_{|\underline{m}|=k} F(l;\underline{m})\mathrm{sgn}(M(\underline{m}))\underbrace{[H_0, T(\underline{m})]}_{=M(\underline{m})T(\underline{m})} \\
\Rightarrow \sum_{k,|\underline{m}|=k} \lambda^k \frac{dF(l;\underline{m})}{dl}\cdot T(\underline{m}) \quad &= \\
&\sum_{\substack{k_1,k_2\\|\underline{m}_1|=k_1\\|\underline{m}_2|=k_2}} \lambda^{k_1+k_2} F(l;\underline{m}_1)F(l;\underline{m}_2)\mathrm{sgn}(M(\underline{m}_1))[T(\underline{m}_1), T(\underline{m}_2)] \\
&- \sum_{k,|\underline{m}|=k} \lambda^k F(l;\underline{m})|M(\underline{m})|T(\underline{m}) \ .
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Durch Vergleich der Koeffizienten eines jeden $T(\underline{m})$ erhält man eine Differentialgleichung für die Funktionen $F(l;\underline{m})$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl}F(l;\underline{m}) \quad &= \quad -|M(\underline{m})|F(l;\underline{m}) + \\
&\sum_{\substack{\{\underline{m}_1,\underline{m}_2\}=\underline{m}\\|\underline{m}|\geq 2}} \left[\mathrm{sgn}(M(\underline{m}_1)) - \mathrm{sgn}(M(\underline{m}_2))\right] F(l;\underline{m}_1)F(l;\underline{m}_2).
\end{aligned} \tag{1.44}$$

[2]Dieser Zusammenhang folgt formal aus Gl. (1.40):

$$\begin{aligned}
M(\underline{m})t_{i,j}(\underline{m}) \quad &= \quad ([H_0, T(\underline{m})])_{i,j} \\
&= \quad (h_i^0 - h_j^0)t_{i,j}(\underline{m}) \\
\Rightarrow \mathrm{sgn}(M(\underline{m}))t_{i,j}(\underline{m}) \quad &= \quad \mathrm{sgn}(h_i^0 - h_j^0)t_{i,j}(\underline{m})
\end{aligned}$$

Die Summierungsbedingung $\{\underline{m}_1, \underline{m}_2\} = \underline{m}$ bedeutet, daß über alle möglichen nichttrivialen Aufspaltungen von $\underline{m}$ zu summieren ist:

$$\begin{aligned}
\underline{m}_1 = (m_1) &\quad \text{und} \quad \underline{m}_2 = (m_2, \ldots, m_k) \\
\underline{m}_1 = (m_1, m_2) &\quad \text{und} \quad \underline{m}_2 = (m_3, \ldots, m_k) \\
\underline{m}_1 = (m_1, m_2, m_3) &\quad \text{und} \quad \underline{m}_2 = (m_4, \ldots, m_k) \\
&\quad \vdots \\
\underline{m}_1 = (m_1, \ldots, m_{k-2}) &\quad \text{und} \quad \underline{m}_2 = (m_{k-1}, m_k) \\
\underline{m}_1 = (m_1, \ldots, m_{k-1}) &\quad \text{und} \quad \underline{m}_2 = (m_k) \; .
\end{aligned} \tag{1.45}$$

$|\underline{m}| \geq 2$ unter dem Summenzeichen bedeutet, daß die Summe im Fall $|\underline{m}| = 1$ keinen Beitrag liefert. Die Differentialgleichung (1.44) ist rekursiv. Die Funktionen $F(l; \underline{m})$ können Ordnung für Ordnung bestimmt werden. Das heißt, daß aus der Kenntnis aller $F(l; \underline{m})$ mit $|\underline{m}| < k$ die $F(l; \underline{m})$ mit $|\underline{m}| = k$ berechnet werden können. Die Zahl $k = |\underline{m}|$ der Komponenten von $\underline{m}$ wird von jetzt an Ordnung k genannt. Die Anfangsbedingungen werden festgelegt durch die Vereinbarung

$$H(0) = H = H_0 + \lambda(T_{-2} + T_{-1} + T_0 + T_1 + T_2) \; .$$

(siehe Gln. (1.28, 1.30) und $N = 2$). Mit Gl. (1.38) zusammen bedeutet das nämlich

$$F(0; \underline{m}) = 1, \text{ falls } \quad |\underline{m}| = 1 \text{ und } m \in \{0, \pm 1, \pm 2\} \tag{1.46}$$

$$F(0; \underline{m}) = 0 \quad \text{sonst} \; . \tag{1.47}$$

Die Differentialgleichung (1.44) kann weiter vereinfacht werden. Der erste Term auf der rechten Seite generiert einen exponentiellen Vorfaktor. Mit dem Ansatz

$$F(l; \underline{m}) = e^{-|M(\underline{m})|l} f(l; \underline{m}) \tag{1.48}$$

wird Gl. (1.44) zu

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl} f(l; \underline{m}) &= \sum_{\substack{\{\underline{m}_1, \underline{m}_2\} = \underline{m} \\ |\underline{m}| \geq 2}} e^{(|M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)|)l} \cdot \\
&\qquad [\operatorname{sgn}(M(\underline{m}_1)) - \operatorname{sgn}(M(\underline{m}_2))] \, f(l; \underline{m}_1) f(l; \underline{m}_2) \; .
\end{aligned} \tag{1.49}$$

Daß ein solcher exponentieller Faktor abspaltbar sein würde, ließ Punkt (iv) (asymptotisches Verhalten) der Zusammenfassung am Ende des letzten Abschnitts 1.1 bereits erkennen.
Mit dem Aufstellen der Differentialgleichungen (1.44) ist Schritt I formal beendet. Die beiden folgenden Abschnitte 1.3 und 1.4 beschäftigen sich mit dem Auffinden ihrer Lösungen und deren Eigenschaften. Da man prinzipiell nur am Limes $l \to \infty$ der $F(l;\underline{m})$ interessiert ist, definieren wir Koeffizienten

$$C(\underline{m}) := \lim_{l\to\infty} F(l;\underline{m}) \ . \tag{1.50}$$

Aus den Gl. (1.38, 1.31) und

$$H_{\text{eff}} = \lim_{l\to\infty} H(l) \tag{1.51}$$

folgt damit

$$\boxed{H_{\text{eff}} = H_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k \sum_{\substack{|\underline{m}|=k \\ M(\underline{m})=0}} C(\underline{m}) T(\underline{m})} \ . \tag{1.52}$$

Man beachte, daß im Limes $l \to \infty$ nur noch über all diejenigen Vektoren $\underline{m}$ zu summieren ist, für die $M(\underline{m}) = 0$ gilt. Die Tatsache, daß alle anderen Koeffizienten verschwinden, gilt nach Konstruktion (Gl. (1.37)). Diese und andere nützlichen Eigenschaften der $F(l;\underline{m})$ werden im folgenden Abschnitt 1.3 zusammengestellt.
Abschließend kann man sagen, daß es gelungen ist, eine kontinuierliche unitäre Transformation anzugeben, die den Ausgangshamiltonian im Limes $l \to \infty$ auf einen deutlich einfacheren effektiven Operator abbildet. Dieser wird in einer Potenzreihe des kleinen Parameters λ geliefert. Die einzig unbekannten Größen in dieser Potenzreihe sind die Koeffizienten $C(\underline{m})$, die aus einer rekursiven Differentialgleichung mit anschließender Limesbildung gewonnen werden können.

1.3 Eigenschaften der $\boldsymbol{F(l;\underline{m})}$

In diesem Abschnitt sollen einige nützliche Eigenschaften der Funktionen $f(l;\underline{m})$ bzw. $F(l;\underline{m})$ diskutiert werden. Die rekursive Natur von Gl. (1.44) ermöglicht ein induktives Vorgehen beim Nachweis dieser Eigenschaften. Dadurch gewinnt dieser Abschnitt einen recht formalen Charakter. Für den eiligen Leser wurden die wesentlichen Ergebnisse deshalb in gerahmten Kästen zusammengestellt.

Die jeweiligen Beweisargumentationen werden im Anschluß an diese angeführt. Auch in diesem Abschnitt wird in den meisten Formulierungen $N = 2$ verwendet. Gegebenenfalls wird an den entsprechenden Stellen erläutert, wie die Beweisführung auf den allgemeinen Fall erweitert werden kann.

Im Limes $l \to \infty$ wird die Blockdiagonalisierung verwirklicht. Man kann zeigen, daß

$$\lim_{l\to\infty} F(l;\underline{m}) = 0 \ , \quad \text{falls } M(\underline{m}) \neq 0 \ . \tag{1.53}$$

Das heißt, im Limes $l \to \infty$ bleiben nur Terme mit $|M(\underline{m})| = 0$ übrig. Diese Terme erhalten die Zahl der Energiequanten . Das war zu erwarten, nachdem wir im Abschnitt 1.2 gezeigt hatten, daß $[H_0, H(\infty)] = 0$ gilt.

Dazu beachte man zunächst, daß in Gl. (1.49) immer $|M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)| \leq 0$ gilt. Ein exponentielles Anwachsen der $f(l;\underline{m})$ ist also ausgeschlossen. Das Umrechnen auf die $F(l;\underline{m})$ durch Gl. (1.48) sorgt dann für den Faktor $\exp(-|M(\underline{m})|l)$, wodurch sichergestellt wird, daß Gl. (1.53) gilt.

Die einfache bandähnliche Struktur des Ausgangsproblems bleibt während der Transformation erhalten. Das dabei wesentliche Element ist die Differenz der Signumfunktionen in den eckigen Klammern von Gl. (1.49). An Gl. (1.38) liest man ab, daß die einfache Struktur genau dann für alle l erhalten bleibt, falls

$$F(l;\underline{m}) = 0 \ , \quad \text{für} |M(\underline{m})| > 2 \ . \tag{1.54}$$

Dann verbindet $H_\mathrm{S}(l)$ immer nur solche Unterräume U_i und U_j, für die $|i-j| \leq 2$ gilt. Es kann induktiv gezeigt werden, daß Gl. (1.54) für alle l gilt.

Beweis durch Induktion.

Induktionsverankerung
Trivial, da für $k = 1$ in Gl. (1.38) nach Konstruktion nur $T_{\pm 2}$, $T_{\pm 1}$ und T_0 vorkommen.

Induktionsschritt
Annahme:
In allen Ordnungen $\leq k$ gelte $f(l;\underline{m}) = 0$, für $|M(\underline{m})| > 2$.
Schluß auf $k+1$:

Aus der Annahme folgt, daß $d/dl f(l; \underline{m}) \neq 0$ mit $|M(\underline{m})| > 2$ in Ordnung $k+1$ nur durch solche Summanden entstehen kann, für die eine Aufteilung $(\underline{m}_1, \underline{m}_2)$ von $\underline{m}$ derart vorliegt, daß $M(\underline{m}_1)$ und $M(\underline{m}_2) \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$ gilt. Sonst würde $f(l; \underline{m}_1)$ oder $f(l; \underline{m}_2)$ verschwinden und somit der gesamte Summand. Gilt aber $M(\underline{m}_1)$ und $M(\underline{m}_2) \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$, so kann nur ein $d/dl f(l; \underline{m}) \neq 0$, mit $|M(\underline{m})| \leq 4$ entstehen. Im Falle $3 \leq |M(\underline{m})| \leq 4$ müssen dann aber $M(\underline{m}_1)$ und $M(\underline{m}_2)$ beide gleichzeitig positiv bzw. negativ sein, was die eckige Klammer $[\mathrm{sgn}(M(\underline{m}_1)) - \mathrm{sgn}(M(\underline{m}_2))]$ in beiden Fällen zum Verschwinden bringt. In Ordnung $k+1$ gilt also ebenfalls $d/dl f(l; \underline{m}) = 0$, falls $|M(\underline{m})| > 2$ ist. Mit den Anfangsbedingungen (1.47) und der Umrechnungsvorschrift (Gl. 1.48) auf die $F(l; \underline{m})$ folgt dann die Gültigkeit der Behauptung auch für $k+1$.

Im Fall $N \neq 2$ kann die Argumentation genauso geführt werden.

Ebenfalls durch Induktion kann man zeigen, daß die $f(l; \underline{m})$ Summen von Termen der Gestalt $l^i \exp(-2\mu l)$ sind, wobei $i, \mu > 0$. Genauer gilt

$$f(l; \underline{m}) = \sum_{\mu=0}^{\Gamma(\underline{m})} P_\mu(l; \underline{m}) e^{-2\mu l} \ , \tag{1.55}$$

wobei $P_\mu(l; \underline{m})$ Polynome in l über den rationalen Zahlen sind, deren Grad immer kleiner oder gleich $|\underline{m}|$ ist. Die obere Grenze der Summe ist gegeben durch

$$\Gamma(\underline{m}) = \frac{1}{2} \left(-|M(\underline{m})| + \sum_{i=1}^{|\underline{m}|} |m_i| \right) \ . \tag{1.56}$$

Man beachte, daß $\Gamma(\underline{m})$ immer größer oder gleich Null ist. An der funktionalen Form (1.55, 1.56) liest man ab, daß die $f(l; \underline{m})$ und damit die $F(l; \underline{m})$ reellwertige Funktionen sind.

Zunächst macht man sich klar, daß der exponentielle Faktor auf der rechten Seite von (1.49) immer einen Beitrag der Form $\exp(-2\mu l)$ liefert, wobei $\mu \in \{0, 1, 2, \ldots \Gamma(\underline{m})\}$. Dies gelingt leicht durch die Feststellung, daß $|M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)|$ immer eine gerade Zahl ergibt.
Nun kann per Induktion gezeigt werden, daß die funktionale Form der $f(l; \underline{m})$, durch die Gln. (1.55, 1.56) wiedergegeben wird:

Induktionsverankerung
Für $k = 1$ folgert man aus den Anfangsbedingungen (1.46) leicht, daß die $f(l;m) = 1$ sind, was sich mit der Behauptung deckt.

Induktionsschritt
Annahme:
Die Behauptung sei für alle $\underline{m}$ mit $|\underline{m}| < k$ wahr.
Schluß auf k:

1.) (Allgemeine Form) Mit der Annahme wird aus dem Produkt $f(l;\underline{m}_1)f(l;\underline{m}_2)$ auf der rechten Seite von Gl. (1.49) für alle $\underline{m}$ mit $|\underline{m}| = k$:

$$\sum_{\mu=0}^{\Gamma(\underline{m}_1)} \sum_{\nu=0}^{\Gamma(\underline{m}_2)} \underbrace{P_\mu(l;\underline{m}_1)P_\nu(l;\underline{m}_2)}_{P_{\mu,\nu}(l;\underline{m})} e^{-2(\mu+\nu)l} \ , \tag{1.57}$$

mit $\deg(P_{\mu,\nu}(l;\underline{m})) \leq |\underline{m}_1| + |\underline{m}_2| = |\underline{m}|$. Gl. (1.57) kann umgeschrieben werden zu

$$\sum_{\mu=0}^{\Gamma(\underline{m}_1)+\Gamma(\underline{m}_2)} \tilde{P}_\mu(l;\underline{m})e^{-2\mu l} \ , \tag{1.58}$$

wobei die $\tilde{P}_\mu(l;\underline{m})$ lediglich die neuindizierten $P_{\mu,\nu}(l;\underline{m})$ sind. Wie oben gezeigt, sorgt der exponentielle Faktor auf der rechten Seite von Gl (1.49) nun noch für eine Multiplikation mit einem Term der Gestalt $\exp(-2\tilde{\mu}l)$, was zwar in der Berechnung der Obergrenze $\Gamma(\underline{m})$ berücksichtigt werden muß, für die allgemeine Form allerdings keine Rolle spielt.

2.) (Obergrenze) Betrachtet man in Gl. (1.58) den Fall des größten μ, also $\mu = \Gamma(\underline{m}_1)+\Gamma(\underline{m}_2)$ und berücksichtigt den globalen exponentiellen Faktor, so erhält man dort für den Exponenten bis auf den Faktor l

$$\begin{aligned}
& -2\Gamma(\underline{m}_1) - 2\Gamma(\underline{m}_2) + |M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)| \\
\overset{\text{Gl. (1.56)}}{=} \quad & |M(\underline{m}_1)| + |M(\underline{m}_2)| \underbrace{- \sum_{i=1}^{|\underline{m}_1|} |m_{1_i}| - \sum_{i=1}^{|\underline{m}_2|} |m_{2_i}|}_{-\sum_{i=1}^{|\underline{m}|} |m_i|} \\
+ \quad & |M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)| \\
= \quad & |M(\underline{m})| - \sum_{i=1}^{|\underline{m}|} |m_i| = -2\Gamma(\underline{m}) \ ,
\end{aligned} \tag{1.59}$$

so daß $\Gamma(\underline{m})$ die neue Obergrenze darstellt. Die noch durchzuführende Summation über alle Aufteilungen $(\underline{m}_1, \underline{m}_2) = \underline{m}$ und anschließende Integration über l ändert nichts mehr an der funktionalen Form, sondern überführt die $\tilde{P}_\mu(l;\underline{m})$ aus Gl. (1.58) lediglich in ihre endgültige Form $P_\mu(l;\underline{m})$, wie sie durch Gl. (1.55) gegeben ist.

Es ist prinzipiell möglich, Rekursionsformeln für die Polynome $P_\mu(l;\underline{m})$ anzugeben, siehe z.B. [2] für den Fall $N = 1$. Diese sind allerdings recht unübersichtlich und bringen keine neuen Einsichten, weshalb hier auf deren explizite Angabe verzichtet wird. Wie wir im nächsten Abschnitt 1.4 darlegen werden, können die Funktionen $f(l;\underline{m})$ durch eine symbolische Rechner-Implementierung direkt aus den rekursiven Differentialgleichungen (1.49) gewonnen werden.

Zuletzt können noch zwei Identitäten für die $F(l;\underline{m})$ hergeleitet werden. Mit den Notationen $-\underline{m} = (-m_1, -m_2, \ldots, -m_k)$ und $\underline{\tilde{m}} = (m_k, \ldots, m_2, m_1)$ findet man :

$$F(l;\underline{m}) = F(l;-\underline{\tilde{m}}) \tag{1.60}$$

$$F(l;-\underline{m}) = (-1)^{|\underline{m}|+1} F(l;\underline{m}) \; . \tag{1.61}$$

Gl. (1.60) ist eine Folge der Hermitezität des Ausgangshamiltonians. Es ist jedoch bequemer, beide Gleichungen induktiv zu zeigen. Die Identitäten können später zur Überprüfung von Ergebnissen benutzt werden.

Die Beweise der beiden Identitäten werden über die Gl. (1.49) geführt. Der Übergang von den $f(l;\underline{m})$ zu den $F(l;\underline{m})$ durch Gl. (1.48) bereitet keine Schwierigkeiten, da in jedem Fall $|M(\underline{m})| = |M(-\underline{\tilde{m}})|$ und $|M(\underline{m})| = |M(-\underline{m})|$ gilt. Zunächst der Nachweis von Gl. (1.60):

<u>Induktionsverankerung</u>
Wie oben folgert man für $k = 1$ aus den Anfangsbedingungen (1.46), daß die $f(l;m) = 1$ sind, so daß Gl. (1.60) gilt.

<u>Induktionsschritt</u>
Annahme:
Die Identität gelte für alle $F(l;\underline{m})$ mit $|\underline{m}| < k$.
Schluß auf k:

Im Falle $|\underline{m}| = k$ gilt wegen Gl. (1.49)

$$\frac{d}{dl} f(l; -\underline{\tilde{m}}) \;=\; \sum_{\substack{\{-\underline{\tilde{m}}_1, -\underline{\tilde{m}}_2\} = -\underline{\tilde{m}} \\ |-\underline{\tilde{m}}| \geq 2}} e^{(|M(-\underline{\tilde{m}})| - |M(-\underline{\tilde{m}}_1)| - |M(-\underline{\tilde{m}}_2)|)l} \cdot$$
$$[\mathrm{sgn}(M(-\underline{\tilde{m}}_1)) - \mathrm{sgn}(M(-\underline{\tilde{m}}_2))]\, f(l; -\underline{\tilde{m}}_1) f(l; -\underline{\tilde{m}}_2) \;. \quad (1.62)$$

Dabei ist die Summation über alle Aufteilungen von $-\underline{\tilde{m}}$ auszuführen, genau so, wie es durch Gl. (1.45) definiert wurde. Für *jede* Aufteilung $(-\underline{\tilde{m}}_1, -\underline{\tilde{m}}_2)$ gilt aber nun

1.) $|M(-\underline{\tilde{m}})| - |M(-\underline{\tilde{m}}_1)| - |M(-\underline{\tilde{m}}_2)| = |M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)|$,

2.) $[\mathrm{sgn}(M(-\underline{\tilde{m}}_1)) - \mathrm{sgn}(M(-\underline{\tilde{m}}_2))] = [\mathrm{sgn}(M(\underline{m}_2)) - \mathrm{sgn}(M(\underline{m}_1))]$,
und wegen der Annahme

3.) $f(l; -\underline{\tilde{m}}_1) f(l; -\underline{\tilde{m}}_2) = f(l; \underline{m}_1) f(l; \underline{m}_2)$.

Nach einem Umordnen der Summe erkennt man, daß $f(l; -\underline{\tilde{m}})$ und $f(l; \underline{m})$ den gleichen Differentialgleichungen genügen. Wegen der Gln. (1.47, 1.48) unterliegen sie auch den gleichen Anfangsbedingungen, so daß insgesamt $f(l; -\underline{\tilde{m}}) = f(l; \underline{m})$ folgt. Zusammen mit der Vorbemerkung ist Gl. (1.60) damit bewiesen.

Die Argumentation für die zweite Identität (Gl. (1.61)) verläuft analog:

1'.) $|M(-\underline{m})| - |M(-\underline{m}_1)| - |M(-\underline{m}_2)| = |M(\underline{m})| - |M(\underline{m}_1)| - |M(\underline{m}_2)|$,

2'.) $[\mathrm{sgn}(M(-\underline{m}_1)) - \mathrm{sgn}(M(-\underline{m}_2))] = [\mathrm{sgn}(M(\underline{m}_2)) - \mathrm{sgn}(M(\underline{m}_1))]$,

3'.) $f(l; -\underline{m}_1) f(l; -\underline{m}_2) = (-1)^{|\underline{m}_1| + |\underline{m}_2| + 2} f(l; \underline{m}_1) f(l; \underline{m}_2)$.

Zieht man in jedem Summanden einen Faktor (-1) aus der Differenz der Signumfunktionen heraus, so bekommt man zusammen mit 3'.) den globalen Faktor $(-1)^{|\underline{m}_1| + |\underline{m}_2| + 3} = (-1)^{|\underline{m}| + 1}$, um den sich die Differentialgleichung für $f(l; -\underline{m})$ von der für $f(l; \underline{m})$ unterscheidet. Da beide Differentialgleichungen den gleichen Anfangsbedingungen unterliegen, bleibt der Faktor nach der Integration bestehen und liefert den in Gl. (1.61) dargestellten Zusammenhang.

1.4 Implementierung

Das wesentliche Ergebnis des Abschnitts 1.2 ist Gl. (1.52). Hier soll nun beschrieben werden, wie die Koeffizienten $C(\underline{m})$, das heißt zunächst die $F(l; \underline{m}) =$

$\exp(-|M(\underline{m})|l)f(l;\underline{m})$, mittels der Differentialgleichungen (1.49) bestimmt werden. Aufgrund ihrer rekursiven Natur liegt es nahe, diese Differentialgleichungen mit Hilfe eines Rechners zu lösen.
Im vorangegangenen Abschnitt 1.3 wurde mit Gl. (1.55) gezeigt, daß den reellen Funktionen $f(l;\underline{m})$ eine einfache funktionale Gestalt zu Grunde liegt. Eine genauere Betrachtung von (1.49) zeigt, daß ein Algorithmus, der Funktionen vom Typ (1.55) integrieren, miteinander multiplizieren und addieren kann, benötigt wird, um (1.49) rekursiv zu lösen. Man wird es also nicht vermeiden können, die Berechnungen `symbolisch` durchzuführen. In diesem Kontext entschieden wir uns für die Programmiersprache `C++`. Aufgrund ihres Klassenkonzepts und der ermöglichten Überladung von Operatoren ist sie besonders geeignet, um hier eine übersichtliche Kodierung zu gewährleisten.
Der erste Schritt zur Implementierung der Berechnungen besteht im Auffinden des elementaren Datensatzes, mit dem die benötigte Arithmetik definiert werden kann. Offensichtlich lassen sich die Funktionen $f(l;\underline{m})$ als eine Liste von elementaren Termen der Form

$$\frac{p}{q}l^i e^{-2\mu l} \tag{1.63}$$

schreiben. Das heißt, ein elementarer Datensatz wird durch Angabe der vier `integer` `p`,`q`,`i` und μ charakterisiert, wobei nur `p` vorzeichenbehaftet sein soll. Es hat sich herausgestellt, daß `p` und `q` bei Berechnungen von $f(l;\underline{m})$ in hohen Ordnungen (ab $|\underline{m}| \geq 8$) sehr groß werden. Diese `integer` müssen in einem Multipräzisions-Datentyp abgelegt werden. Einige Unix-Systeme, wie das von uns verwendete Solaris Unix, bieten dazu den Typ `long long int` an, der ganze Zahlen im Bereich $\pm 10^{19}$ verwalten kann. Da der Grad der Polynome $P_\mu(l;\underline{m})$ (siehe Gl. (1.55)) kleiner als $|\underline{m}|$ ist, reicht es für unsere Zwecke aus, die Exponenten `i` im Datentyp `char` abzulegen. Gleiches gilt für μ. Um sie verketten zu können, müssen die elementaren Datensätze aufeinander verweisen können, so daß man schematisch zu folgender Klasse kommt:

```
class ED {
long long int p;
unsigned long long int q;
char i;
char μ;
ED * next;}
```

Man rechnet nach, daß man pro elementaren Datensatz einen Speicherbedarf von 22 Byte hat.

Um die benötigten Operationen mit den $f(l;\underline{m})$ ausführen zu können, definiert man Multiplikation, Addition und Integration zunächst auf der Menge der elementaren Datensätze. Die Implementierung der Integration gelingt leicht durch

$$\begin{aligned}\int_0^l dl' l'^i &= \frac{1}{i+1} l^{i+1} \\ \int_0^l dl' l'^i e^{-\alpha l'} &= \frac{i!}{\alpha} \cdot \left\{ \frac{1}{\alpha^i} - e^{-\alpha l} \sum_{j=0}^{i} \frac{l^j}{j! \alpha^{i-j}} \right\}, \text{ falls } \alpha > 0 \ . \end{aligned} \qquad (1.64)$$

Im ersten Fall sind lediglich die Variablen `q` und `i` des zu integrierenden elementaren Datensatzes in angegebener Weise zu modifizieren. Im zweiten Fall führt die Integration auf $\mathtt{i}+2$ Datensätze. Neben der Modifikation des ursprünglichen Datensatzes müssen also noch $\mathtt{i}+1$ weitere allokiert, initialisiert und durch ihre `next`-Zeiger untereinander verbunden werden.
In einem späteren Schritt werden die Koeffizienten $C(\underline{m})$ durch den Limes $l \to \infty$ berechnet. Wie in Abschnitt 1.3 besprochen, ist diese Limesbildung nur für solche $F(l;\underline{m})$ durchzuführen, für die $M(\underline{m}) = 0$ gilt. Man beachte, daß in diesem Fall $F(l;\underline{m}) = f(l;\underline{m})$ ist und außerdem $\alpha > 0$, da Aufteilungen $(\underline{m}_1, \underline{m}_2)$ mit $M(\underline{m}_1) = 0$ und $M(\underline{m}_2) = 0$ wegen des Verschwindens der Differenz der Signumfunktionen keinen Beitrag zur Summe auf der rechten Seite von Gl. (1.49) liefern. Dadurch vereinfacht sich die Limesberechnung erheblich; der Faktor proportional zu $\exp(-\alpha l)$ auf der rechten Seite von Gl. (1.64) verschwindet. Man erkennt, daß das Ergebnis in jedem Fall durch eine rationale Zahl dargestellt werden kann.
Die Regeln für Addition und Multiplikation der elementaren Datensätze sind klar. Um den rationalen Vorfaktor `p/q` dabei nicht unnötig groß werden zu lassen, wird in beiden Operationen der Euler-Algorithmus zum Auffinden des größten gemeinsamen Teilers von `p` und `q` verwendet, so daß `p/q` immer der maximal gekürzte Bruch ist.
Die Funktionen $f(l;\underline{m})$ werden dargestellt durch einfach verkettete Listen von elementaren Datensätzen, die jeweils von Objekten der Klasse `f`

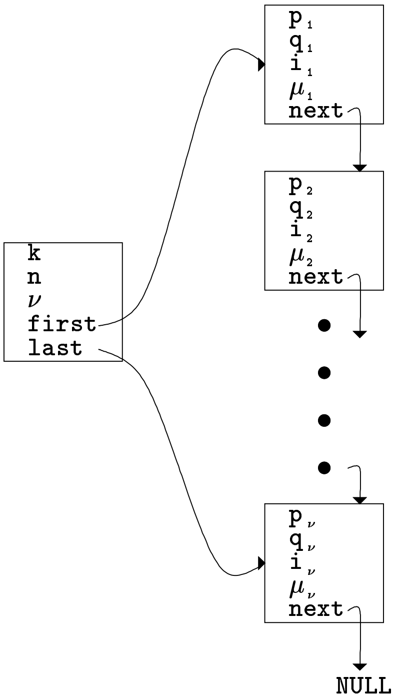

Abbildung 1.2: Darstellung einer Funktion $f(l;\underline{m})$ in der Ordnung k mit Hilfe der Klassen `f` und `ED`.

```
class f {
unsigned int   k     //Ordnung
unsigned int n  //m-Kodierung
unsigned int anzahl-ED;
ED * first;
ED * last;}
```

verwaltet werden. Schematisch bekommt man die in Abb. 1.2 gezeigte rechnerinterne Darstellung.
Die Operationen Integration, Addition und Multiplikation auf der Menge der elementaren Datensätze können leicht zu den entsprechenden Operationen für die verketteten Listen verallgemeinert werden. Um den Speicherverbrauch zu minimieren, werden die Listen nach Anwendung der Operationen von einem `quick-sort` Algorithmus nach steigenden Potenzen von l und e sortiert. Dabei werden elementare Datensätze mit gleichen Potenzen identifiziert und addiert. Schließlich wird der Speicher von nicht mehr benötigten Datensätzen freige-

geben. Die Funktionen $f(l;\underline{m})$ werden also immer als verkettete Listen von linear unabhängigen, elementaren Datensätzen im Speicher des Rechners dargestellt.
Mit den bislang angestellten Überlegungen kann die eigentliche Berechnung der $f(l;\underline{m})$ im wesentlichen durch zwei Schleifen um die Gl. (1.49) implementiert werden. Die äußere der beiden kontrolliert die Ordnung k. Da die Anfangsbedingungen durch $f(l;m) = 1$ für $k = 1$ gegeben sind, beginnt die Schleife bei $k = 2$. In der inneren Schleife werden alle $\underline{m}$ der aktuellen Ordnung k auf folgende Weise generiert (Wir beschränken uns erneut auf den Fall $N = 2$, also $H_{\text{S}} = T_{-2} + T_{-1} + T_0 + T_1 + T_2$.): In $\underline{m} = (m_1, \dots, m_i, \dots, m_k)$ ist $m_i \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$. Ein m_i kann also fünf verschiedene Werte annehmen. Es bietet sich an, die Kontrollvariable $n \in \{0, 1, \dots, 5^k - 1\}$ der inneren Schleife umzuschreiben

$$n = \sum_{i=0}^{k} a_i 5^i \ . \tag{1.65}$$

Die Koeffizienten $a_i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ werden nun durch eine eindeutige Vorschrift auf die Menge $\{-2, -1, 0, 1, 2\}$ abgebildet. Auf diese Weise durchläuft die Schleifenvariable n ihren Wertevorrat und generiert systematisch alle $\underline{m}$ der aktuellen Ordnung. Bei jedem Durchlauf der inneren Schleife wird die Berechnung von Gl. (1.49) mittels der weiter oben diskutierten Operationen nur für solche $\underline{m}$ durchgeführt, für die die Bedingung $|M(\underline{m})| \leq 2$ erfüllt ist. Im Falle $|M(\underline{m})| = 0$ wird abschließend noch der Limes $l \to \infty$ durchgeführt und das Ergebnis $C(\underline{m})$ nebst $\underline{m}$ selbst in einer Ausgabedatei abgelegt.
Es bleibt zu klären, wie eine einzelne Funktion $f(l;\underline{m})$ bei vorgegebener Ordnung k und Tupel $\underline{m}$ berechnet wird:

(i) Ein neues Objekt der Klasse `f` wird angelegt, und mit den aktuellen Werten von k und n (also $\underline{m}$) initialisiert. Die Zeiger `first` und `last` zeigen beide auf einen einzelnen elementaren Datensatz, in dem `p` und `q` auf Eins und `i` sowie μ auf Null gesetzt werden.

(ii) Gl. (1.49) wird in eine weitere Schleife eingebunden, die alle Aufteilungen von $\underline{m}$ kontrolliert (siehe Gl. (1.45)).

(iii) Die Funktionen $f(l;\underline{m}_1)$ und $f(l;\underline{m}_2)$, die durch Rechnungen in kleineren Ordnungen als k bekannt sind und im `RAM` gespeichert sind, werden für jede Aufteilung $\underline{m} = \{\underline{m}_1, \underline{m}_2\}$ miteinander multipliziert. Nach der eventuellen Multiplikation mit dem exponentiellen Faktor (das heißt nach der Manipulation von μ in allen miteinander verketteten, elementaren Datensätzen), wird das Zwischenergebnis im Speicher abgelegt.

(iv) Solange die Schleife (ii) über alle Aufteilungen läuft, werden die Zwischenergebnisse aufaddiert.

(v) Abschließend wird das Ergebnis aus (ii) bis (iv) integriert und existiert für den Rest der Berechnung als $f(l;\underline{m})$ symbolisch in dem unter (i) allokierten Objekt `f` im `RAM` des Rechners.

Die in Abschnitt 1.3 abgeleiteten Symmetrierelationen (1.60, 1.61) für die $F(l;\underline{m})$ (damit auch für die $C(\underline{m})$) können zur Überprüfung der abgespeicherten Koeffizienten herangezogen werden.
Die rekursive Natur der Gl. (1.49) ermöglicht die einfache Implementierung der Koeffizientenberechnung. Allerdings führt sie auch zu einer Limitierung dieser Berechnung. Im Prinzip müssen sämtliche Funktionen $f(l;\underline{m})$ aller vorangehenden Ordnungen bekannt sein, also im `RAM` verfügbar sein, um ein $f(l;\underline{m})$ in der aktuellen Ordnung berechnen zu können. Das führt zu einem raschen Anstieg des benötigten Speichers. Für den Fall $N = 2$ konnten wir die Koeffizienten bis einschließlich zehnter Ordnung bestimmen. Dabei wurden rund 30,000,000 elementare Datensätze benutzt, was einem Speicherbedarf von etwa 1GB entspricht. Der Speicherbedarf stieg pro Ordnung in etwa um den Faktor sechs. Die von uns benutzte `SUN Ultra Enterprise 10000`, die uns freundlicherweise vom Regionalen Rechenzentrum der Universität zu Köln zur Verfügung gestellt wurde, benötigte etwa 12h für die Rechnung.
Es sei darauf hingewiesen, daß alle Berechnungen mit dem Datentyp `integer` durchgeführt werden können. Es kommt nicht zu Laufzeitschwierigkeiten und die Ergebnisse sind exakt im numerischen Sinne.
Für $N = 2$ sind die Koeffizienten $C(\underline{m})$ bis einschließlich sechster Ordnung im Anhang A angegeben. Bei Bedarf werden alle berechneten Koeffizienten gerne elektronisch zur Verfügung gestellt. Die Berechnung der Koeffizienten im Fall $N \neq 2$ kann nach einigen geringfügigen Änderungen des Algorithmus leicht durchgeführt werden.
Damit ist der modellunabhängige Teil der vorliegenden Arbeit beendet. Abschließend möchten wir noch einmal darauf hinweisen, daß die gewonnenen Koeffizienten einen universellen Charakter haben. Ist N einmal fixiert, so gelten sie für alle Modelle, die den Punkten (A) und (B) des Abschnitts 1.2 genügen. Das zentrale Ergebnis desselben Abschnitts (Gl. (1.52)) kann, hat man die Koeffizienten einmal berechnet, sofort angegeben werden. Zu leisten bleibt die Bestimmung der Operatoren T_n und die Berechnung der Wirkung von H_{eff} auf interessierende Zustände des untersuchten Modells. Im nun folgenden zweiten Teil der Arbeit soll genau dieses Programm an zwei Spinmodellen durchgeführt werden.

Teil II

Anwendungen

Kapitel 2

Anwendung I

In diesem Kapitel wollen wir den in Teil I der Arbeit hergeleiteten störungstheoretischen Formalismus auf ein erstes Spinmodell anwenden, um dessen Grundzustandsenergie, Energielücke und Ein-Magnon-Dispersion zu bestimmen. Nach einer kurzen Vorstellung und Motivation des Modells (Abschnitt 2.1) wird konkret erläutert, wie eine rechnergestützte Auswertung implementiert werden kann (Abschnitte 2.2 und 2.3). Man erhält perturbative Ergebnisse, die in Abschnitt 2.4 ausführlich diskutiert und mit den Resultaten anderer Methoden verglichen werden.

2.1 Dimerisierte frustrierte $S = 1/2$ Kette

In dieser ersten Anwendung betrachten wir ein antiferromagnetisches eindimensionales Spin-1/2-Modell. Dimerisierung bedeutet hier eine Alternierung

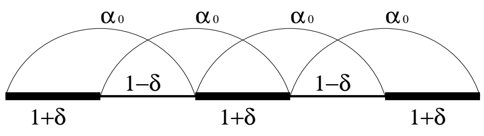

Abbildung 2.1: Ausschnitt der dimerisierten und frustrierten $S = \frac{1}{2}$ Kette.

der Nächstnachbar-Kopplung angedeutet durch die abwechselnd dick und dünn gezogenen Linien in Abb. 2.1. Gleichzeitig kann eine Frustration $\alpha_0 > 0$ anwesend sein. Der Hamiltonoperator des Modells läßt sich schreiben als (j ist der Platzindex)

$$H = J_0 \sum_{j=1}^{L} \left[(1 + (-1)^j \delta) \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \alpha_0 \mathbf{S}_{j-1} \mathbf{S}_{j+1} \right] \ , \tag{2.1}$$

wobei L die Anzahl der Plätze ist und eine gerade Zahl sein soll. Wir schreiben den Hamiltonoperator um, indem wir die Ersetzungen

$$\begin{aligned} J &= J_0(1+\delta) \\ \lambda &= \frac{1-\delta}{1+\delta} \\ \alpha &= \frac{\alpha_0}{1-\delta} \end{aligned} \tag{2.2}$$

machen. Damit erhalten wir (der Index i zählt die Dimere)

$$\begin{aligned} H \ = \ & J \sum_{i=0}^{\frac{L}{2}-1} [\mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i+1} + \lambda \mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i-1} + \\ & \lambda \, \alpha (\mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i-2} + \mathbf{S}_{2i-1} \mathbf{S}_{2i+1})] \ . \end{aligned} \tag{2.3}$$

Bis auf die triviale Konstante $3L/8$ sind der ungestörte Hamiltonoperator und der Störanteil festgelegt durch

$$H_0 = \sum_i [\mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i+1} + 3/4] \tag{2.4}$$

$$H_{\mathrm{S}} = \sum_i [\mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i-1} + \alpha \left(\mathbf{S}_{2i} \mathbf{S}_{2i-2} + \mathbf{S}_{2i-1} \mathbf{S}_{2i+1} \right)] \ , \tag{2.5}$$

wobei alle Energien implizit in Einheiten von J gemessen werden.
Der Grundzustand von H_0 ist gegeben durch das Produkt von Singuletts auf den Dimeren, das heißt auf den Bindungen $(2i, 2i+1)$. Die Energiequanten sind angeregte Dimere, also lokale Tripletts. Die Anzahl der Tripletts klassifiziert die entarteten Energie-Eigenräume des ungestörten Systems.
Im Falle starker Dimerisierung, das heißt λ ist klein, liegt mit den Gln. (2.4, 2.5) ein System vor, das die Bedingungen (A) und (B) des Abschnitts 1.2 mit $N = 2$ erfüllt. Das zentrale Ergebnis (1.52) des Abschnitts 1.2 kann vorbehaltlos verwendet werden.
Abgesehen davon, daß die frustrierte und dimerisierte Kette ein gutes Modell zur Erprobung der im ersten Teil vorgestellten Methode darstellt, gibt es

auch physikalische Gründe, sich mit ihr zu beschäftigen. Ideale Spin-Peierls-Systeme sind eindimensionale Spinsysteme, die an das Gitter gekoppelt sind. Bei genügend tiefen Temperaturen dimerisieren sie, denn diese Dimerisierung bewirkt einen Energiegewinn $\propto \delta^{4/3}$, welcher den Verlust an elastischer Energie $\propto \delta^2$ überkompensiert. (Siehe dazu z.B. [7] und darin angegebene Verweise.) Die erste anorganische Spin-Peierls-Substanz $CuGeO_3$ stellt ein Beispiel für eine frustrierte und dimerisierte Kette dar. Da wir uns in Kapitel 3 dieser Arbeit vornehmlich mit dieser Substanz beschäftigen wollen, sollen an dieser Stelle einige ihrer Eigenschaften vorgestellt werden. Außerdem kann der Hamiltonoperator (2.1) so motiviert werden.
Die Kristallstruktur von $CuGeO_3$ ist in Abb. 2.2 dargestellt. Die Cu^{2+} Ionen

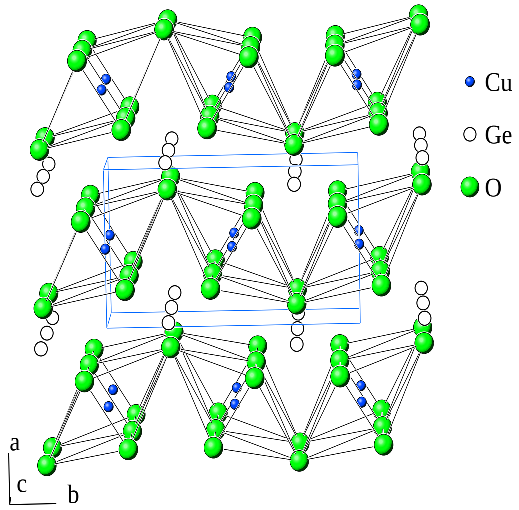

Abbildung 2.2: Kristallstruktur von $CuGeO_3$. Die Spinketten bilden sich entlang der c-Richtung aus (siehe auch Abb. 2.3).

tragen den Spin 1/2. In c-Richtung bilden sich CuO_4 Plaquetten. Die dominante magnetische Wechselwirkung innerhalb der Ketten in c-Richtung (siehe Abb. 2.3) ist die Kopplung zwischen den Cu^{2+} Spins, die durch Superaustausch über die Sauerstoffbrücken vermittelt wird. Der $Cu - O - Cu$ Bindungswinkel beträgt nahezu 90°. Die Kopplung ist antiferromagnetisch [8]. Die Wechselwirkungsstärke ist recht gering, weshalb die frustrierende Übernächstnachbar-Wechselwirkung über den Austauschpfad $Cu - O - O - Cu$ in den Rechnungen berücksichtigt werden sollte. Eine eindimensionale Modellierung der Substanz wird nahegelegt durch Untersuchungen der magnetischen Dispersion senkrecht zu den Ketten, welche um etwa eine Größenordnung kleiner ist

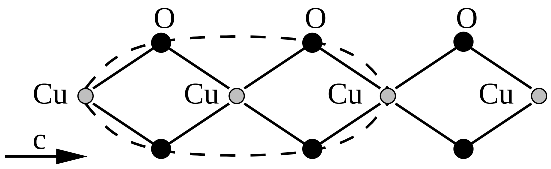

Abbildung 2.3: c-Richtung der Kristallstruktur von $CuGeO_3$. Nächste Nachbarkopplung entlang der durchgezogenen ,Übernächstnachbar-Kopplung entlang der gestrichelten Linien.

als die Austauschwechselwirkung innerhalb der Ketten [9, 4, 3]. Durch eine leichte Änderung der Bindungswinkel unterhalb der kritischen Temperatur $T_{\mathrm{SP}} = 14.2\mathrm{K}$ dimerisiert die in Abb. 2.3 dargestellte Kette, so daß der Hamiltonoperator (2.1) insgesamt eine sinnvolle Modellierung von $CuGeO_3$ darstellt. Andere Beispiele, die durch Gl. (2.1) dargestellt werden können, sind stark anisotrope Substanzen, in denen eine Dimerisierung durch ihre chemische Struktur eingebaut ist. Zu erwähnen sind hier $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ [10] und $(VO)_2P_2O_7$ [11].
Im folgenden soll die im ersten Teil der Arbeit beschriebene Methode benutzt werden, um die Grundzustandsenergie, die Energielücke und die Ein-Magnon-Dispersion des Hamiltonoperators (2.1) zu berechnen. Man könnte einwenden, daß exakte Diagonalisierung oder Monte-Carlo-Simulationen besser geeignet sind, um diese Größen in dem hier vorliegenden eindimensionalen Problem zu bestimmen. Abgesehen davon, daß diese erste Anwendung eine Art Testlauf für später zu behandelnde mehrdimensionale Modelle darstellt (siehe Abschnitt 3.1), bietet unser Verfahren hier einen Vorteil gegenüber den üblicherweise verwendeten Methoden. Diese liefern immer nur Resultate für einen vorgegebenen Parametersatz, während unsere Methode Ergebnisse in Form von Polynomen in den Kopplungskonstanten λ und α bereitstellt. Hat man sie einmal berechnet, können die Resultate von jedem benutzt werden. Sie können z.B. leicht an experimentelle Daten angepaßt werden, wodurch Kopplungskonstanten sehr schnell bestimmt werden können.

2.2 Allgemeine Gleichungen

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie die Kenntnis der Koeffizienten $C(\underline{m})$ im effektiven Hamiltonoperator (1.52) des Abschnitts 1.2 benutzt werden kann, um konkrete Berechnungen durchzuführen. Der erste Schritt besteht im Auffinden der Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren T_n des betrachteten Modells (Gln. (2.4, 2.5)). Anschließend berechnen wir die Grundzustandsenergie, die Energielücke sowie die Ein-Magnon-Dispersion des Modells, indem wir

die entsprechenden Gleichungen auf einem Rechner implementieren.
Die explizite Form der Operatoren T_n muß so bestimmt werden, daß

$$H_{\mathrm{S}} = T_{-2} + T_{-1} + T_0 + T_1 + T_2 \tag{2.6}$$

gilt (siehe Gln. (1.28, 2.5)). Dazu betrachten wir zunächst nur einen Summanden von H_{S}

$$\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-1} + \alpha\left(\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-2} + \mathbf{S}_{2i-1}\mathbf{S}_{2i+1}\right) \ . \tag{2.7}$$

Offensichtlich wirkt dieser Teiloperator nur auf die Spins benachbarter Dimere. Als erstes berechnen wir die Matrixelemente

$$\langle x_{i-1}, x_i | \mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-1} | x_{i-1}, x_i \rangle \ , \tag{2.8}$$

wobei $x_{i-1}, x_i \in \{s, t^1, t^0, t^{-1}\}$ die Singuletts oder eines der Tripletts auf den benachbarten Dimeren $i-1$ bzw. i darstellen sollen. Der Index $n \in \{0, \pm 1\}$ in t^n steht für die drei möglichen Werte der S^z Komponente der Tripletts. Für einen festen, aber beliebigen Wert von i schreiben wir

$$\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-1} = \mathcal{T}_{-2} + \mathcal{T}_{-1} + \mathcal{T}_0 + \mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 \ , \tag{2.9}$$

und fordern, daß der Index der $\mathcal{T}$ die Änderung der Zahl der vorhandenen Tripletts ausdrücken soll. Mit anderen Worten läßt es sich folgendermaßen formulieren: Matrixelemente, die ein Ket, bestehend aus zwei Singuletts, mit einem Bra aus zwei Tripletts verbinden, sind Einträge in der Matrix $\mathcal{T}_2$. Solche Matrixelemente, die ein Ket, bestehend aus einem Singulett und einem Triplett, mit einem Bra aus zwei Tripletts verbinden, sind Einträge in der Matrix $\mathcal{T}_1$ und so weiter. Auf diese Art und Weise findet man alle $\mathcal{T}_n$, und ihre Summe ergibt $\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-1}$. Tabelle 2.1 faßt die gefundenen Ergebnisse zusammen, wobei es sich, wie man weiter unten sehen wird, als vorteilhaft erweist, die Aufteilung $\mathcal{T}_0 = \mathcal{T}_0^a + \mathcal{T}_0^b$ vorzunehmen. Alle anderen Matrixelemente können aus der Beziehung $\mathcal{T}_n^\dagger = \mathcal{T}_{-n}$ leicht hergeleitet werden.
Um nun den Effekt der Frustration mit einzubauen, genügt es festzustellen, daß ein Triplett invariant unter dem Austausch seiner Spins ist, wohingegen ein Singulett bei dieser Operation den Faktor (-1) hinzugewinnt. Wenn man

$$\alpha(\mathbf{S}_{2i}\mathbf{S}_{2i-2} + \mathbf{S}_{2i-1}\mathbf{S}_{2i+1}) = \sum_{n=-2}^{2} \mathcal{T}'_n \tag{2.10}$$

	$4\mathcal{T}_0^a$	
$\vert t^{0,\pm1}, s\rangle$	$\longrightarrow$	$-\vert s, t^{0,\pm1}\rangle$
	$4\mathcal{T}_0^b$	
$\vert t^0, t^{\pm1}\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^{\pm1}, t^0\rangle$
$\vert t^{\pm1}, t^{\pm1}\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^{\pm1}, t^{\pm1}\rangle$
$\vert t^{\pm1}, t^{\mp1}\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^0, t^0\rangle - \vert t^{\pm1}, t^{\mp1}\rangle$
$\vert t^0, t^0\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^1, t^{-1}\rangle + \vert t^{-1}, t^1\rangle$
	$4\mathcal{T}_1$	
$\vert s, t^1\rangle, \vert t^1, s\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^1, t^0\rangle - \vert t^0, t^1\rangle$
$\vert s, t^0\rangle, \vert t^0, s\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^1, t^{-1}\rangle - \vert t^{-1}, t^1\rangle$
$\vert s, t^{-1}\rangle, \vert t^{-1}, s\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^0, t^{-1}\rangle - \vert t^{-1}, t^0\rangle$
	$4\mathcal{T}_2$	
$\vert s, s\rangle$	$\longrightarrow$	$\vert t^1, t^{-1}\rangle - \vert t^0, t^0\rangle + \vert t^{-1}, t^1\rangle$

Tabelle 2.1: Wirkung der durch Gl. (2.9) definierten Operatoren $\mathcal{T}_i$.

ansetzt, so lassen sich die $\mathcal{T}_n'$ Operatoren per Spinaustausch auf die $\mathcal{T}_n$, wie sie durch Tabelle 2.1 gegeben sind, reduzieren, und man erhält

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_{\pm2}' &= -2\alpha\cdot\mathcal{T}_{\pm2} \\
\mathcal{T}_{\pm1}' &= 0 \\
\mathcal{T}_0'^a &= -2\alpha\cdot\mathcal{T}_0^a \\
\mathcal{T}_0'^b &= 2\alpha\cdot\mathcal{T}_0^b\ .
\end{aligned}\tag{2.11}$$

Abschließend wird durch Gl. (2.6) die Form der Operatoren T_n festgelegt

$$\begin{aligned}
T_{\pm2} &= \sum_{i=0}^{\frac{L}{2}-1}(1-2\alpha)\cdot\mathcal{T}_{\pm2} \\
T_{\pm1} &= \sum_{i=0}^{\frac{L}{2}-1}\mathcal{T}_{\pm1} \\
T_0 &= \sum_{i=0}^{\frac{L}{2}-1}(1-2\alpha)\cdot\mathcal{T}_0^a + (1+2\alpha)\cdot\mathcal{T}_0^b\ .
\end{aligned}\tag{2.12}$$

Im sich anschließenden Abschnitt 2.3 wird gezeigt, wie die Operatoren T_n auf einem Rechner implementiert werden können.

Die Grundzustandsenergie der antiferromagnetischen $S = 1/2$ Heisenbergkette, gegeben durch Gln. (2.4, 2.5), kann nun durch (H_{eff} ist der effektive Hamiltonoperator (1.52).)

$$E_0 = \langle 0|H_{\text{eff}}|0\rangle \tag{2.13}$$

berechnet werden, wobei wir die Abkürzung $|0\rangle := |\prod_i s_i\rangle$ für den Produktzustand von Singuletts auf allen Dimeren eingeführt haben. Dieser Zustand kann als Triplettvakuum aufgefaßt werden.

Die konkreten Berechnungen werden auf einem endlichen Segment der Kette durchgeführt. Wegen des *Linked Cluster Theorems* wissen wir, daß die Anteile niedriger Ordnung einer kurzreichweitigen Perturbation nicht von der Größe des Clusters abhängen, auf dem sie berechnet werden, falls dieser ausreichend dimensioniert wird. In dem hier betrachteten eindimensionalen Modell sind nur benachbarte Dimere miteinander verbunden. Es reicht also aus, die Berechnungen auf einem Kettensegment von elf Dimeren durchzuführen, um einen Überschlagsfehler in Ordnung zehn zu vermeiden. Das bedeutet, daß wir sicher sein können, so den thermodynamischen Beitrag zu finden. Außerdem können wir die Längenunabhängigkeit durch Rechnungen mit verschiedenen Kettenlängen überprüfen.

Um die Ein-Magnon-Dispersion zu berechnen, müssen wir den Unterraum betrachten, in dem genau ein Singulett zu einem Triplett angeregt ist. Wir definieren den Zustand $|j\rangle := |s, s, \ldots, t, \ldots, s\rangle$. Er ist dadurch charakterisiert, daß Dimer j von einem Triplett t besetzt ist, während alle übrigen mit Singuletts s besetzt sind. (Die S^z Komponente spielt in dieser Betrachtung keine Rolle; sie ist daher weggelassen.) Um die Dispersion zu erhalten, berechnen wir die Wirkung des effektiven Hamiltonoperators (1.52) auf den Zustand $|j\rangle$. Da H_{eff} die Anzahl vorhandener Tripletts nach Konstruktion erhält, kann das Ausgangstriplett durch seine Wirkung nur verschoben werden

$$H_{\text{eff}}|j\rangle = J \cdot \sum_i a_i |j+i\rangle \ . \tag{2.14}$$

Wegen der Translationsinvarianz der Kette (jedes Dimer ist gleich) hängen die Koeffizienten a_i nicht von der ursprünglichen Position j des Tripletts ab. An dieser Stelle sei betont, daß die Translationsinvarianz in keiner Weise notwendig ist, um unsere Perturbationsmethode auf das vorliegende Problem anwenden zu können. Wie zu Beginn des Abschnitts 1.2 erläutert wurde, ist es gerade einer der Vorteile der Methode, daß die Eigenzustände nicht im voraus bekannt sein müssen und die Berechnungen im Ortsraum durchgeführt werden können. Natürlich kann die Invarianz trotzdem ausgenutzt werden.

In zehnter Ordnung läuft die Variable i in Gl. (2.14) von -10 bis 10. Wählt man j in angemessener Weise, und berücksichtigt man, daß ein Operatorprodukt $T(\underline{m})$ ein Triplett um maximal $|\underline{m}|$ Dimere verschiebt, so reicht es aus, ein Kettensegment mit elf Dimeren zu betrachten, um alle Koeffizienten a_i zu bestimmen. Um z.B. a_{10} zu berechnen, sollte $j = 0$ gewählt werden. Für a_0 wäre $j = 5$ die richtige Wahl. Alle Dimerplätze, die innerhalb von zehn Hüpfprozessen erreicht werden können, wenn man bei j startet und bei $j + i$ landen will, müssen in dem betrachteten Kettensegment enthalten sein, um *finite size* Effekte zu verhindern. Auf Grund der Translationsinvarianz wissen wir, daß eine Fouriertransformation in den Impulsraum die durch ihren Gitterimpuls k charakterisierten Eigenzustände

$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_j e^{-ikj} |j\rangle \tag{2.15}$$

liefert. Wenden wir auf diese nun den effektiven Hamiltonoperator H_{eff} an, so erhalten wir (man beachte die periodischen Randbedingungen)

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}|k\rangle &= J\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=1}^{L/2} \sum_n e^{-ikj} a_n |j+n\rangle \\ &= J\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=1}^{L/2} \sum_n e^{-ik(j-n)} a_n |j\rangle \\ &= J \sum_n e^{ikn} a_n \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=1}^{L/2} e^{-ikj} |j\rangle}_{|k\rangle} \ . \end{aligned} \tag{2.16}$$

Zusammen mit den zu $|k\rangle$ gehörenden Eigenenergien

$$\omega(k) = \langle k|\, H_{\text{eff}} |k\rangle - E_0 \tag{2.17}$$

bekommen wir schließlich

$$\omega(k) = J \cdot a_0 - E_0 + J \cdot \sum_{j=1}^{\infty} 2a_j \cdot \cos(jk) \ . \tag{2.18}$$

Für die dimerisierte Kette liegt das Minimum der Dispersion, die Triplettlücke, bei $k = 0$

$$\Delta = \omega(k = 0) \ . \tag{2.19}$$

Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, wie die soeben hergeleiteten Gleichungen auf einem Rechner implementiert werden können.

Zustand	(bit1 bit2)	dezimal
s	(00)	0
t^{-1}	(01)	1
t^1	(10)	2
t^0	(11)	3

Tabelle 2.2: Kodierung der Kettenzustände.

2.3 Implementierung

Für die Implementierung der Gln. (2.13) und (2.14) bedienen wir uns wieder der Programmiersprache C++. Im ersten Teil dieses Abschnitts wird der allgemeine Algorithmus beschrieben, der in der Berechnung beider Gleichungen zur Anwendung kommt. Im zweiten Teil wird gezeigt, wie der allgemeine Algorithmus an die speziellen Anforderungen der einzelnen Gleichungen angepaßt werden kann.
Um die verschiedenen Zustände der dimerisierten Kette computergerecht kodieren zu können, genügt es, zwei Bits pro Dimer zu reservieren. Ein `integer X`, der eine Länge von vier Bytes hat, kann also einen Zustand einer Kette mit 32 Plätzen oder 16 Dimeren kodieren, indem das unterste Bit Platz Eins, das zweitunterste Platz Zwei repräsentiert und so weiter. Durch Anwendung der Operatoren T_i, definiert in den Gln. (2.12) des vorangegangenen Abschnitts, erhält man polynomiale Vorfaktoren in α für die Zustände `X`. Es liegt also nahe, die elementaren Datensätze als Objekte der Klasse `EDS` zu definieren.

```
class EDS {
unsigned int X //Zustandskodierung
POLYNOM * first;
EDS * next;}
```

```
class POLYNOM {
short int alphaexponent
int prefactor
POLYNOM * next;}
```

Auf diese Weise kann jedem kodierten Zustand `X` der Kette ein polynomialer Vorfaktor in Form einer einfach verketteten Liste zugeordnet werden. Ein solches Objekt nennen wir „elementarer Zustand".
Die innersten Teile des Algorithmus sind der Implementierung der $\mathcal{T}_n$ Matrizen gewidmet, welche immer nur auf zwei benachbarte Dimere der gesamten Kette wirken. Jedes Matrixelement dieser $\mathcal{T}_n$ wird im Algorithmus durch einen Block Programmiersprache dargestellt. Jeder dieser Blöcke allokiert eine entsprechende Anzahl von elementaren Datensätzen, die mit dem aktuellen Zustand der Kette samt seines Vorfaktors initialisiert werden. Danach werden diejenigen Bits des Zustands, die die beiden aktuell betrachteten benachbarten Dimere darstellen, gemäß den Regeln der Tabelle 2.1 modifiziert.
Betrachten wir ein Beispiel. Der momentan untersuchte Zustand der Kette sei $\mathtt{X}= (00\underline{1111}0\ldots0)$, wobei die unterstrichenen Bits für das aktuell zu verändernde Dimerpaar stehen. Der Tabelle 2.2 entnimmt man, daß sich beide Dimere im t^0 Zustand befinden. Aus der Tabelle 2.1 geht nun hervor, daß zwei weitere Zustände $\mathtt{X}_1$ und $\mathtt{X}_2$ allokiert (und natürlich durch ihre `next` Zeiger untereinander verbunden) werden müssen, wobei sie die Werte $\mathtt{X}_1= (00\underline{1001}0\ldots0)$ und $\mathtt{X}_2= (00\underline{0110}0\ldots0)$ annehmen. Der ursprüngliche Zustand `X` darf noch nicht gelöscht oder umgeschrieben werden. Er wird im weiteren Verlauf noch benötigt, da auch alle anderen Dimerpaare der Wirkung der Operatoren unterliegen.
Auf diesen elementaren Betrachtungen aufbauend lassen sich die T_n in sechs Schritten implementieren.

(i) Die Anzahl der Plätze L wurde gerade gewählt. Wir führen eine Schleifenvariable

$$\mathtt{p} \in \{1, 2, \ldots, \frac{L}{2}\} \tag{2.20}$$

ein, so daß $\mathtt{p} = 1$ die Dimere 0 und 1, $\mathtt{p} = 2$ die Dimere 1 und 2 adressiert und so weiter. Periodische Randbedingungen werden dadurch realisiert, daß $\mathtt{p} = L/2$ die Dimere $L/2 - 1$ und 0 adressiert.

(ii) Die Adressierung wird folgendermaßen umgesetzt. Aus der Variable `p` wird eine Bitmaske konstruiert, in der die vier Bits des adressierten Dimerpaars auf Eins und alle übrigen Bits auf Null gesetzt werden. Beispielsweise wird aus $\mathtt{p} = 1$ die Bitmaske $(11110\ldots0)$, und aus $\mathtt{p} = 2$ wird $(0011110\ldots0)$.

(iii) Das aktuell zu betrachtende Dimerpaar kann nun durch die aus `p` gewonnene Bitmaske aus dem Zustand `X` herausgeschnitten werden. Dazu verknüpft man `X` und die Bitmaske mit dem logischen `AND` Operator

$$\mathtt{x} = (\text{Bitmaske})\ \mathtt{AND}\ (\mathtt{X}, \text{der Kettenzustand})\ . \tag{2.21}$$

(iv) Wie man sich leicht überlegt, legt der dezimale Wert von $\mathtt{x} \in \{0, 1, \ldots, 15\}$ eindeutig fest, in welcher der 16 möglichen Zustandskombinationen sich das betrachtete Dimerpaar befindet. Folglich wird `x` in einer `SWITCH-CASE` Anweisung benutzt, um zu dem Programmblock zu springen, in dem das entsprechende Matrixelement von $\mathcal{T}_n$ (wie weiter oben beschrieben) implementiert ist.

(v) Den Gln. (2.12) genügend wird der entsprechende Vorfaktor an die neu allokierten und modifizierten Zustände heranmultipliziert.

(vi) Schließlich wird der Wert von `p` um Eins erhöht und der Algorithmus springt zu Punkt (i) zurück, solange die Bedingung (2.20) erfüllt ist.

Folgt man diesen Schritten, so erhält man eine Summe von elementaren Zuständen mit jeweils eigenen polynomialen Vorfaktoren. Diese stellen den neuen Zustand der Kette dar, nachdem ein Operator T_i auf einen Ausgangszustand gewirkt hat. Im allgemeinen wird der vollständige Zustand der Kette nach der Anwendung eines Operators T_i also eine lineare Kombination von elementaren Zuständen sein. Diese wird rechnerintern als einfach verkettete Liste von Objekten der Klasse `EDS` dargestellt. Da diese Liste nach ihrer Erzeugung identische Zustände `X` enthalten kann, wird sie nach wachsenden Werten von `X` durch einen `quick-sort` Algorithmus sortiert. Dabei werden gleiche Zustände identifiziert und addiert. Nicht mehr benötigte Zustände werden der Liste entnommen und der entsprechende Speicher wieder freigegeben. Ähnlich verfährt man mit den jeweiligen Vorfaktoren, die intern auch als solche Listen verwaltet werden.
Um Produkte von T_i Operatoren zu berechnen, wendet man den eben beschriebenen Algorithmus mehrfach an. Ist der Ausgangszustand der Kette bereits eine lineare Kombination von elementaren Zuständen, so ist der Algorithmus auf jeden Summanden dieser Kombination anzuwenden.
Wir kommen jetzt dazu, die konkreten Größen auszurechnen. Um die Grundzustandsenergie zu bestimmen, müssen Ausdrücke der Gestalt
$\lambda^k \sum_{|\underline{m}|=k} C(\underline{m}) T(\underline{m})$ aus Gl. (1.52) des Abschnitts 1.2 für jede Ordnung k auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ angewendet werden. Zunächst wird der aktuelle Index $\underline{m}$ und der zugehörige Koeffizient $C(\underline{m})$ aus der nach Abschnitt 1.4 erzeugten Datei geladen. Dann wendet man $T(\underline{m})$ wie oben beschrieben auf den Zustand $|0\rangle$ an. Da $M(\underline{m}) = 0$ ist, reproduziert $T(\underline{m})$ den Zustand $|0\rangle$ bis auf einen polynomialen Vorfaktor in α. Zusammen mit $C(\underline{m})$ wird dieses Polynom zu einem

Computeralgebra-Programm geschleust. Wir verwenden für diesen Zweck das Programm MAPLE. Dieses multipliziert Koeffizient und Polynom miteinander, während der eigentliche Algorithmus die nächste Berechnung durchführt. Das Schema wiederholt sich, bis alle $\underline{m}$, $C(\underline{m})$ Kombinationen der vorgefertigten Datei abgearbeitet sind. Außerdem wird MAPLE angewiesen, alle zwischendurch berechneten Produkte einer Ordnung k aufzusummieren und global mit dem Faktor λ^k zu versehen. Am Ende liegt das Ergebnis im MAPLE-Format vor und kann sofort weiter benutzt werden.
Für den Hamiltonoperator, gegeben durch die Gln. (2.4, 2.5), berechnen wir auf diese Weise die Grundzustandsenergie pro Spin bis einschließlich zehnter Ordnung in λ und erhalten

$$
\begin{aligned}
\frac{\epsilon_0}{J} = \; & (1-2\alpha)^2 \Bigg[-\frac{3}{4}\overline{\lambda}^2 - \left(\frac{3}{4}+\frac{3}{2}\alpha\right)\overline{\lambda}^3 - \left(\frac{13}{16}+\frac{27}{4}\alpha-\frac{3}{4}\alpha^2\right)\overline{\lambda}^4 \\
& -\left(\frac{89}{48}+\frac{311}{24}\alpha+\frac{93}{4}\alpha^2-\frac{45}{2}\alpha^3\right)\overline{\lambda}^5 - \left(\frac{463}{96}+\frac{227}{9}\alpha+\frac{1307}{12}\alpha^2\right. \\
& \left. -42\alpha^3-\frac{159}{2}\alpha^4\right)\overline{\lambda}^6 - \left(\frac{81557}{6912}+\frac{257909}{3456}\alpha+\frac{215995}{864}\alpha^2\right. \\
& \left. +\frac{173579}{432}\alpha^3-\frac{14865}{16}\alpha^4+\frac{879}{8}\alpha^5\right)\overline{\lambda}^7 - \left(\frac{414359}{12960}+\frac{139801}{648}\alpha\right. \\
& \left. +\frac{8477587}{12960}\alpha^2+\frac{152558}{81}\alpha^3-\frac{2774357}{1620}\alpha^4-4002\alpha^5+\frac{4527}{2}\alpha^6\right)\overline{\lambda}^8 \\
& -\left(\frac{2354594813}{24883200}+\frac{7341879263}{12441600}\alpha+\frac{14053262981}{6220800}\alpha^2+\frac{1591335559}{345600}\alpha^3\right. \\
& \left. +\frac{9560574943}{1555200}\alpha^4-\frac{8121212969}{259200}\alpha^5+\frac{453741}{64}\alpha^6+\frac{248391}{32}\alpha^7\right)\overline{\lambda}^9 \\
& -\left(\frac{106469295871}{373248000}+\frac{82849717337}{46656000}\alpha+\frac{107584683283}{15552000}\alpha^2\right. \\
& +\frac{89796462557}{5832000}\alpha^3+\frac{160938279937}{5832000}\alpha^4-\frac{57686123141}{972000}\alpha^5 \\
& \left. -\frac{143920286959}{972000}\alpha^6+\frac{339171}{2}\alpha^7-\frac{336527}{16}\alpha^8\right)\overline{\lambda}^{10}\Bigg], \qquad (2.22)
\end{aligned}
$$

wobei wir die Abkürzung $\overline{\lambda} = 1/4\lambda$ benutzen.
Um die Dispersion $\omega(k)$ zu berechnen, müssen die Hüpfamplituden a_i in Gl. (2.18)

bestimmt werden. Dazu benutzen wir Gl. (2.14). Wendet man ein Operatorprodukt $T(\underline{m})$ mit $M(\underline{m}) = 0$ auf einen Zustand an, der genau ein Triplett enthält, so wird der Effekt darin bestehen, daß das Triplett um maximal $|\underline{m}|$ Dimere verschoben wird, da die Triplettzahl nicht geändert wird. Es genügt also, die Berechnungen für ein vorgegebenes a_i auf einem entsprechenden Kettensegment durchzuführen, falls man die Ausgangsposition des Tripletts geeignet festlegt. Man beachte, daß das Ergebnis der Anwendung von $T(\underline{m})$ auf einen solchen Ausgangszustand $|j\rangle$ im allgemeinen eine Summe von Zuständen mit jeweils nur einem Triplett (aber auf verschiedenen Dimeren) sein wird (siehe Gl. (2.14)). Für ein bestimmtes a_i muß der entsprechende Zustand aus dieser Liste herausgegriffen werden. Mit dessen polynomialem Vorfaktor verfährt man dann so, wie es für die Grundzustandsenergie weiter oben beschrieben wurde. Die Hüpfamplitude a_i ist gegeben durch das so erhaltene Polynom in λ und α. Die Ergebnisse für die Hüpfamplituden bis einschließlich zehnter Ordnung sind in Anhang B angegeben.
Die Berechnungen wurden auf einer Sun Ultra Workstation durchgeführt und dauerten je nach Kettenlänge L zwischen 10 und 30 Stunden. Dabei wurden zwischen 100 und 500 MB Speicher gebraucht.

2.4 Ergebnisdiskussion

In diesem Abschnitt sollen die gewonnenen Ergebnisse für die frustrierte dimerisierte $S = 1/2$ Kette ausführlich diskutiert und mit Resultaten anderer Methoden verglichen werden.
Bislang bezogen sich unsere Berechnungen auf den Hamiltonoperator (2.4, 2.5) bzw. (2.3). In diesem Abschnitt ziehen wir es vor, unsere Betrachtungen bezüglich des Hamiltonoperators (2.1) zu machen. Dazu ist es notwendig, Rücksubstitutionen gemäß den Gln. (2.2) durchzuführen. Gelegentlich werden wir die im letzten Abschnitt gewonnenen Ergebnisse Umformungen unterziehen, um Informationen über die Kette aus anderen Methoden mit zu berücksichtigen. An dieser Stelle ist es wichtig, sich zu erinnern, daß λ der als klein angenommene Entwicklungsparameter ist. Er sollte als erster substituiert werden, bevor die Ergebnisse weiter umgeformt werden. Die Frustration α wird in solchen Umformungen wie ein fester Parameter behandelt und erst ganz am Ende substituiert.

2.4.1 Grundzustandsenergie

Substituiert man J, λ und α gemäß den Gln. (2.2) in Gl. (2.22), so erhält man die gestrichelte Linie „direktes Polynom“ in Abb. 2.4. Die durchgezogene Linie stellt eine verbesserte Vorgehensweise dar. Zunächst substituiert man J und λ, so daß man einen Ausdruck in δ und α erhält. Nun weiß man aber, daß sich die Grundzustandsenergie unter einer äußeren Dimerisierung verhält wie $\Delta E_0 \propto -\delta^{4/3}$ [12]. Um diese Information zu berücksichtigen, substituiert man $\delta = x^{3/2}$ in den soeben gewonnenen Ausdruck. Wie oben besprochen behandelt man α dabei wie einen festen Parameter. Solange man logarithmische Korrekturen vernachlässigt, gilt dasselbe Potenzgesetz, da es durch Spinrotationssymmetrie geschützt ist [13, 14, 15]. Das heißt, ein festgehaltenes α ändert nichts am Exponenten, solange α kleiner ist als sein kritischer Wert $\alpha_c = 0.241167(\pm 5)$ [16]. Oberhalb dieses Wertes wird die Translationsinvarianz spontan gebrochen, und die führende Ordnung für die Grundzustandsenergie ist linear in der Dimerisierung $\Delta E_0 \propto -\delta$ (siehe auch weiter unten). Das

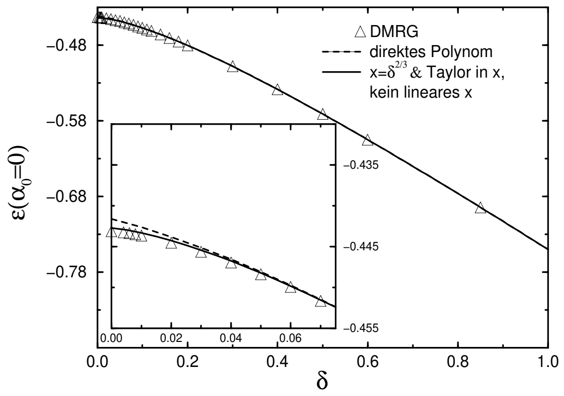

Abbildung 2.4: Grundzustandsenergie pro Platz ϵ als Funktion der Dimerisierung δ ohne Frustration ($\alpha_0 = 0$) für Hamiltonian (2.1). Details finden sich im Text. Der Ausschnitt zeigt eine Vergrößerung für kleine δ.

Ergebnis für die Grundzustandsenergie (jetzt ein Ausdruck in x und α) wird in einer Taylorreihe um $x = 1$ bis einschließlich zehnter Ordnung entwickelt. Man beachte, daß $x = 1$ der Limes starker Dimerisierung ist. Addiert man zu der Entwicklung den Term $Y \cdot (1 - x)^{11}$, so führt man eine Unbekannte Y ein, die so angepaßt werden kann, daß der lineare Term in x verschwindet. Auf diese Weise wird x^2 der führende Term für kleine x, ohne daß die in den Koeffizienten enthaltene Information verändert wird. Nach der Rücksubstitution $x = \delta^{2/3}$ stimmt das Verhalten der Grundzustandsenergie für kleine δ mit dem Kontinuumsergebnis überein. Das Resultat dieses Vorgehens ist die durchgezogene Linie in Abb. 2.4. Beide Kurven werden mit Ergebnissen der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG), dargestellt durch die Dreieckssymbole, verglichen. Die Übereinstimmung ist sehr gut. Wie zu erwarten war, liegt die um das Wissen aus der Kontinuumstheorie erweiterte Darstellung für kleine δ näher an den DMRG Resultaten. Den Ergebnissen kann bis hinunter zu einer Dimerisierung von 2% quantitativ vertraut werden.

Ohne Vorhandensein einer Frustration ($\alpha = \alpha_0 = 0$) ist die rechte Seite von Gl. (2.22) ein Polynom in λ vom Grad zehn mit rationalen Koeffizienten. Barnes *et al.* [17] berechneten mit einen anderen perturbativen Zugang genau dieselben Koeffizienten bis neunter Ordnung, was eine hervorragende Überprüfungsmöglichkeit für unser Ergebnis darstellt. Darüber hinaus berechneten auch Gelfand *et al.* [18] ein Polynom in λ bis in 15 Ordnung. Mit ihrer Methode waren sie in der Lage, die Koeffizienten als reelle Zahlen anzugeben. Wir konnten diese Zahlen im Rahmen der angegebenen Genauigkeit bis zur zehnten Ordnung verifizieren.

Wie im Abschnitt 2.1 ausgeführt, wird die Untersuchung von dimerisierten Spinketten zu einem großen Teil dadurch motiviert, daß sie Spin-Peierls-Systeme modellieren, in denen Spin- und Gitterfreiheitsgrade koppeln. In der adiabatischen Beschreibung dieses Phänomens addiert man einen elastischen Energieterm $K\delta^2/2$ zum Hamiltonoperator (2.1). Dieser Term berücksichtigt, daß es Energie kostet, die magnetische Kopplung zu modulieren. Um den Gleichgewichtswert für δ zu bestimmen, wird die Grundzustandsenergie unter Variation von δ minimiert

$$0 = \frac{\partial \epsilon_0}{\partial \delta} + K\delta \ . \tag{2.23}$$

Man muß also die Ableitung der Grundzustandsenergie ϵ_0 kennen, welche durch den Erwartungswert des Dimerisierungsoperators $H_{\mathrm{DIM}} = (H(\delta) - H(0))/\delta$ pro Platz gegeben ist, wobei H der Operator aus Gl. (2.1) ist

$$\frac{\langle H_{\mathrm{DIM}} \rangle}{L} = \frac{\partial \epsilon_0}{\partial \delta} \ . \tag{2.24}$$

In Abb. 2.5 zeigen wir $\partial\epsilon_0/\partial\delta$, wie es sich unmittelbar aus unseren verbesserten Ergebnissen für die Grundzustandsenergie (durchgezogene Linie in Abb. 2.4) ergibt. Man beachte, daß 3/8 eine obere Grenze für den Erwartungswert der Dimerisierung darstellt. Die Dimerisierung ist maximal, wenn jede zweite Kopplung von einem Singulett besetzt ist $\langle \mathbf{S}_{2j}\mathbf{S}_{2j+1} \rangle = -3/4$. Diese obere Grenze wird durch unsere Rechnung exakt reproduziert. Im Limes $\delta \to 0$

erhalten wir Null. Dieses exakte Ergebnis ergibt sich aus den weiter oben besprochenen Manipulationen an der Grundzustandsenergie, nach denen ϵ_0 als eine Potenzreihe in $x = \delta^{2/3}$ vorliegt, wobei kein lineares x zugelassen wird. Die Ableitung dieses Ausdrucks nach δ bringt den Absoluten Term zum verschwinden. Gleichzeitig wird aber kein neuer absoluter Term generiert, weswegen die Ableitung an der Stelle $\delta = 0$ verschwindet.

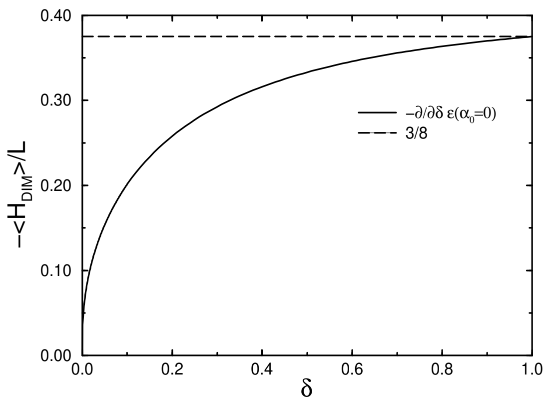

Abbildung 2.5: Erwartungswert des Dimerisierungsoperators H_{DIM} als Funktion der Dimerisierung δ ohne Frustration ($\alpha_0 = 0$).

Die Abb. 2.6 zeigt die Grundzustandsenergie pro Platz für $\alpha_0 = 0.241$ und $\alpha_0 = 0.35$. Im Fall einer überkritischen Frustration wissen wir, daß der führende Term linear in δ ist. Um nun den Übergang vom $\delta^{4/3}$ zum δ Verhalten beschreiben zu können, benutzen wir die Substitution $\delta = x^3$ und unterdrücken den linearen und den quadratischen Term in der Taylorentwicklung, indem wir entsprechend der Ausführung weiter oben geeignete Potenzen von Termen der Form $(1 - x)$ hinzuaddieren. Dieses Verfahren führt auf ein Polynom in δ, das Terme $\propto \delta$ und Terme $\propto \delta^{4/3}$, sowie Terme höherer Potenzen in $\delta^{1/3}$ enthält. Die Übereinstimmung mit den entsprechenden DMRG Daten ist bis hinunter zu sehr kleinen δ Werten exzellent. In Abb. 2.7 findet man die entsprechenden Resultate für den Erwartungswert des Dimerisierungsoperators H_{DIM}.
Im Fall einer endlichen Frustration beschränken wir δ auf das Intervall $[0, 0.2]$. Diese Beschränkung wird uns durch die Natur unseres perturbativen Zugangs auferlegt, der eine Entwicklung um den Limes isolierter Dimere darstellt. Die Frustration α_0 (nicht α!) auf einen bestimmten Wert zu fixieren, bedeutet, daß der Limes $\delta \to 1$ *nicht* mehr der Limes isolierter Dimere ist. Der Punkt $\delta = 1$ entspricht einer Spinleiter mit der Kopplungsstärke $2J_0$ entlang der Sprossen

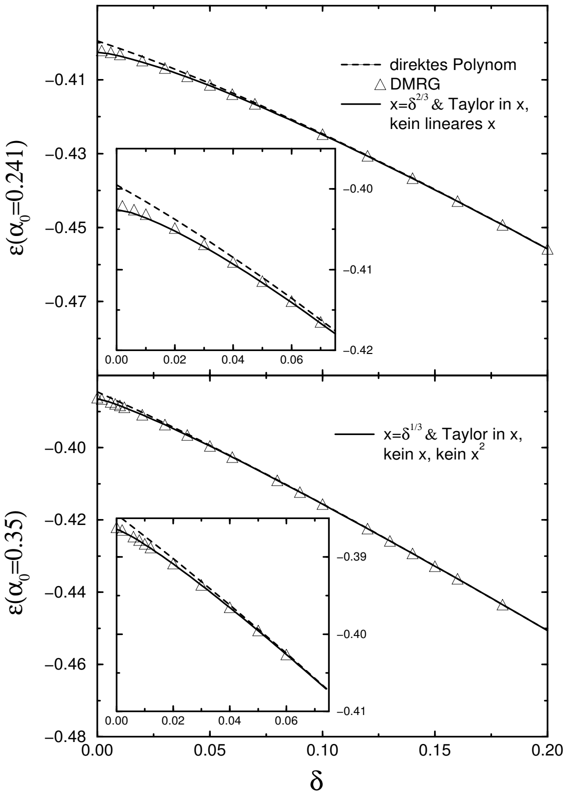

Abbildung 2.6: Grundzustandsenergie ϵ als Funktion der Dimerisierung δ; Frustration $\alpha_0 = 0.241$ im oberen und $\alpha_0 = 0.35$ im unteren Teil der Abbildung. Die Ausschnitte zeigen Vergrößerungen für kleine δ.

und $\alpha_0 J_0$ entlang der Holme. Natürlich gelten unsere direkten perturbativen Ergebnisse auch für dieses Spinleiter-Modell. Die Resultate entsprechen in diesem Fall einer Entwicklung um den Sprossenlimes. Dieser Limes wurde bereits ausgiebig untersucht [19], so daß wir hier von einer weiteren Analyse absehen. An dieser Stelle ist es interessant festzustellen, daß eine perturbative Behandlung der Leiter an sich mit unserer Methode deutlich leichter durchzuführen wäre, da man den Fall $N = 1$ vorliegen hat im Gegensatz zu $N = 2$ in unserer Berechnung der Kette (siehe Bedingungen (A) und (B) des Abschnitts 1.2). Mit anderen Worten: Im Fall der Leiter gibt es keine Erzeugung oder Vernichtung von *zwei* Tripletts, sondern nur Verschiebung, Erzeugung oder Vernichtung eines Tripletts. Die Berechnungen könnten also zu weit höheren Ordnungen getrieben werden.
Um nun den Grund zu verstehen, warum unsere Analyse hier nur beschränkt angewendet werden darf, genügt es, einen einfachen Vergleich von Kopplungs-

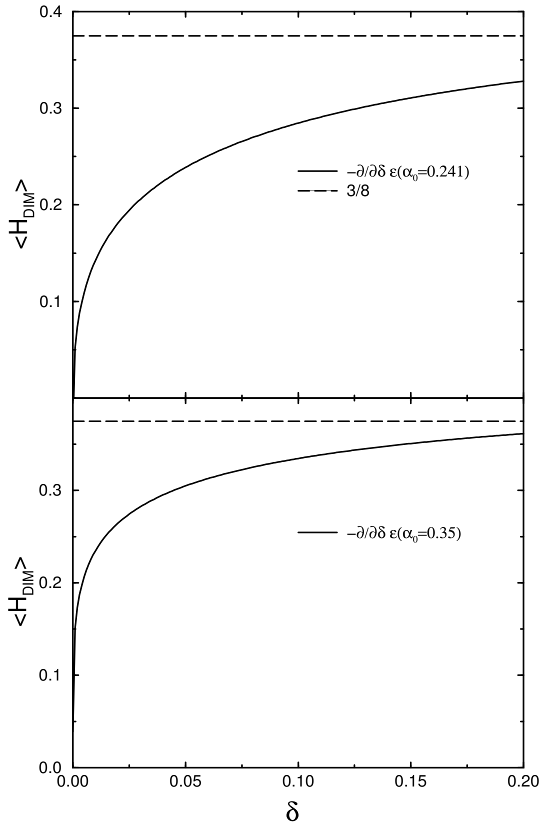

Abbildung 2.7: Erwartungswert des Dimerisierungsoperators H_{DIM} als Funktion der Dimerisierung δ; Frustration $\alpha_0 = 0.241$ im oberen und $\alpha_0 = 0.35$ im unteren Teil der Abbildung.

stärken durchzuführen. Die Ersetzungen $x = \delta^{2/3}$ oder $x = \delta^{1/3}$ sind optimiert, um den Fall, in dem die Kopplung $J_0(1-\delta)$ die dominante Störung ist, zu behandeln. Diese Situation liegt in etwa dann vor, wenn $2\alpha_0 < 1-\delta$ gilt. Ansonsten muß die frustrierende Kopplung als dominante Störung betrachtet werden. In unserer Analyse legen wir uns auf das Regime fest, in dem $1-\delta$ die dominante Störung ist, so daß δ nicht zu groß gewählt werden darf. Für $\alpha_0 \approx 0.35$ sollte die Dimerisierung δ den Wert 0.3 nicht überschreiten.

2.4.2 Energielücke

Der erste Zugang ist wieder, J, λ und α gemäß den Gln. (2.2) in Gl. (2.19) des Abschnitts 2.2 zu substituieren, ohne irgendwelche Manipulationen vorzunehmen. Im Fall $\alpha_0 = 0$ deckt sich unser Ergebnis mit dem Polynom neunten Grades, das Barnes *et al.* [17] für die Energielücke bestimmt haben. Unse-

re Resultate sind in den Abbn. 2.8, 2.9 und 2.11 für verschiedene Werte der Frustration als gestrichelte Kurven unter dem Namen „direktes Polynom“ abgebildet.
Wir verwenden auch hier Ergebnisse der Kontinuumstheorie, um eine Verbesserung unserer Resultate zu erzielen. Für eine unterkritische Frustration erwartet man nach Cross und Fisher [12] ein Verhalten der Lücke Δ für kleine δ gemäß $\Delta \propto \delta^{2/3}$. Bei überkritischer Frustration hat man $\Delta - \Delta|_{\delta=0} \propto \delta^{2/3}$ (siehe z.B. [20]). Um diese Informationen in unsere Ergebnisse einzubinden, werden zunächst J und λ gemäß Gl. (2.2) in Gl. (2.19) substituiert. Sodann ersetzen wir $\delta = x^{3/2}$, wobei α als ein fester Parameter behandelt wird. Das so gewonnene Zwischenergebnis wird durch eine Padé-Approximation um $x = 1$ dargestellt. Der Approximant wurde so gewählt, daß sämtliche Informationen der elf Koeffizienten (hier Polynome in α) auch in der neuen Darstellung erhalten bleiben. In anderen Worten: Der Grad des Zählerpolynoms L, addiert zum Grad des Nennerpolynoms M in der Padé-Approximation, muß zehn ergeben. Es hat sich gezeigt, daß die Aufteilung $L = 5$ und $M = 5$ die beste Darstellung liefert. Nachdem die Ersetzungen $x = \delta^{2/3}$ und α im Approximanten vollzogen sind, erhalten wir die durchgezogenen Kurven der Abbn. 2.8, 2.9 und 2.11. Der Vergleich mit den entsprechenden DMRG Daten zeigt, daß das eben beschriebene Extrapolationsverfahren für die meisten Frustrationswerte außerordentlich präzise Ergebnisse liefert.

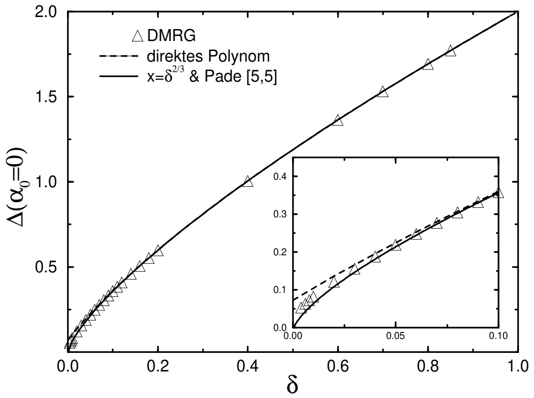

Abbildung 2.8: Energielücke Δ als Funktion der Dimerisierung δ ohne Frustration. Die Zahlen in den Klammern stehen für den Grad des Zählerpolynoms L und den des Nennerpolynoms M im Padé-Approximanten. Der Ausschnitt zeigt eine Vergrößerung für kleine δ.

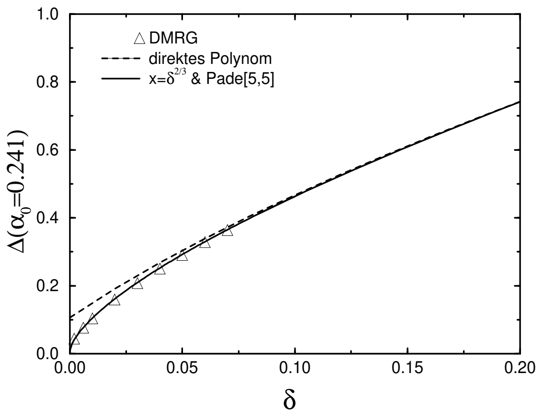

Abbildung 2.9: Energielücke Δ als Funktion der Dimerisierung δ bei kritischer Frustration $a_0 = 0.241$.

Um die Vertrauenswürdigkeit unserer Ergebnisse für den schwierigsten Fall zu überprüfen, extrapolieren wir zu $\delta = 0$. Das heißt, in dem durch das eben beschriebene Verfahren erhaltenen Resultat setzen wir $\delta = 0$. Die Abhängigkeit der Lücke Δ von der Frustration α_0 ist in Abb. 2.10 dargestellt und wird dort mit entsprechenden DMRG Werten [21, 22] und der Darstellung der Energielücke, in der auf eine Padé-Approximation verzichtet wird, verglichen. Man erkennt, daß die Padé Entwicklung erst für größere α_0 relevant wird.
Streng genommen existiert keine Energielücke unterhalb des kritischen Wertes α_c [23]. Den numerischen Wert ($\alpha_c = 0.241167(\pm 5)$) entnehmen wir der Referenz [16]. Die Zacke in Abb. 2.10 bei etwa $\delta = 0.1$ ist ein unphysikalischer Pol, der durch die Padé-Approximation entsteht. Die Übereinstimmung mit den DMRG Daten ist gut, aber nicht hervorragend. Anscheinend führt das Padé-Verfahren nicht auf einen besonders geeigneten Approximanten, um den Verlauf der Lücke als Funktion von α_0 darzustellen. Insbesondere ist die Darstellung nicht dazu geeignet, die wesentliche Singularität an der Stelle kritischer Frustration zu erfassen.
Um eine möglichst breite Analyse unserer Ergebnisse bereitzustellen, haben wir noch andere Approximationen benutzt. Ein besonders geeignetes Verfahren, um Reihenentwicklungen von Funktionen in einer Variable zu approximieren, die ein singuläres Verhalten der Form $(\lambda - \lambda_c)^\gamma$ aufweisen, ist die Methode der *Differential Approximants* (DA). Grob gesprochen, versucht man das polynomiale Ergebnis der Entwicklung in eine Differentialgleichung umzuschreiben, deren Lösung dann die Approximation darstellt [24, 25, 26]. Diese Differen-

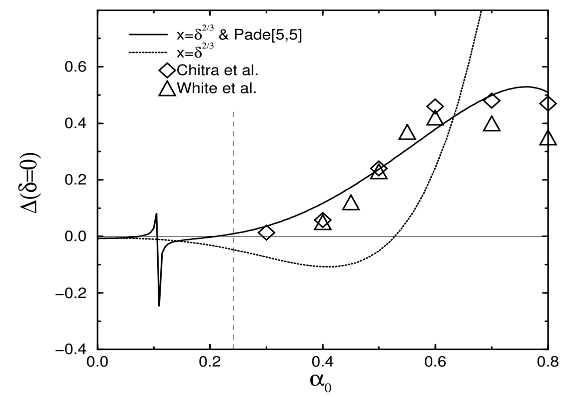

Abbildung 2.10: Energielücke Δ als Funktion der Frustration α bei $\delta = 0$. Die vertikale gestrichelte Linie zeigt den kritischen Wert α_c. Die gepunktete Linie ist die Darstellung der Energielücke, in der nach der Substitution von $x = \delta^{2/3}$ auf eine Padé-Approximation verzichtet wurde.

tialgleichungen können ersten oder zweiten Grades, homogen oder inhomogen sein, je nachdem, welches funktionale Verhalten der „wahren“ Funktion vermutet wird. Für eine Übersicht der verschiedenen Methoden sei auf den Artikel von A.J. Guttmann [27] hingewiesen. Diesen Methoden gemeinsam ist, daß die Position der Singularität λ_c durch einen Pol und der kritische Exponent durch dessen Residuum gegeben sind, die beide leicht bestimmt werden können.
Beim Anwenden dieser Methoden auf unsere Resultate für die Energielücke stellen wir fest, daß es kaum einen Unterschied macht, ob man den Hamiltonoperator (2.1) oder (2.3) benutzt. Genaugenommen liegen die Ergebnisse für Gl. (2.3) etwas besser bei den Voraussagen $\lambda_c = 1$ und $\gamma = 2/3$ als die für Gl. (2.1). Bei Abwesenheit einer Frustration finden wir $\lambda_c = 1.002$ und $\gamma = 0.74$. Der Wert für die Position der Singularität ist ausgezeichnet, während das Ergebnis für den Exponenten etwas ernüchternd ausfällt. Die gleichen Beobachtungen wurden in Ref. [17] gemacht. Eine Voreinstellung des Ortes des Pols (*biased approximation*) bringt keine Verbesserung in γ.
Der Grund für die Schwierigkeiten bei der Bestimmung des korrekten kritischen Exponenten liegt in logarithmischen Korrekturen. Um das zu untermauern, führen wir die Exponentenbestimmung an der Stelle kritischer Frustration $\alpha_0 = \alpha_c$ aus, an der keine logarithmischen Korrekturen auftauchen. Dieses Vorgehen hat sich auch in numerischen Untersuchungen als hilfreich erwiesen [21]. In der Tat finden wir bei $\alpha_0 = \alpha_c$ den deutlich besseren Wert $\gamma = 0.65$, welcher nur 3% von 2/3 abweicht. Des weiteren haben wir versucht,

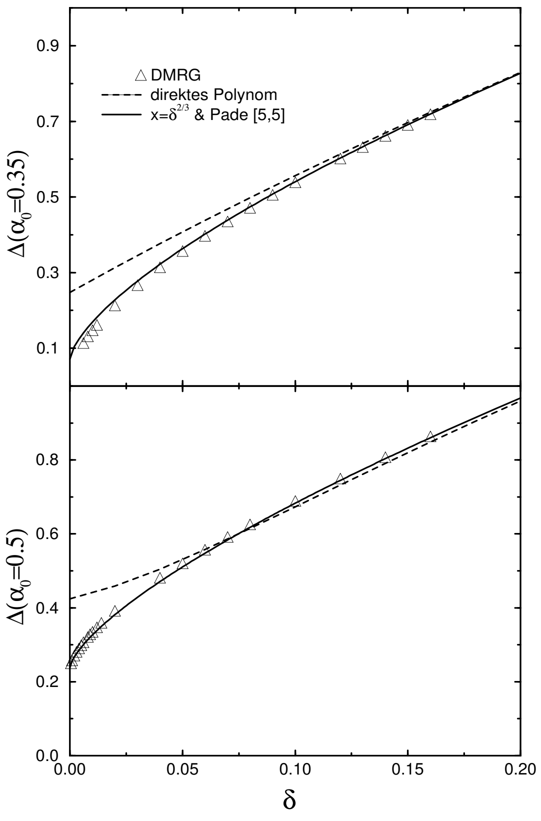

Abbildung 2.11: Energielücke Δ als Funktion der Dimerisierung δ für überkritische Frustration $\alpha_0 = 0.35$ und $\alpha_0 = 0.5$.

die logarithmischen Korrekturen zu berücksichtigen. In der Regel werden sie bei unterkritischer Frustration gemäß

$$\Delta(\delta) \propto \delta^{2/3}/|\ln(\delta/\delta_0)|^{1/2} \tag{2.25}$$

angegeben [28, 14, 15], wobei δ_0 eine unbekannte Konstante ist. Daher wenden wir das DA-Verfahren auf die Funktion

$$f(\delta) := \sqrt{-\ln(\delta) + h(\alpha_0)}\Delta \ , \tag{2.26}$$

an, wobei $h(\alpha_0)$ eine von der Frustration abhängige Konstante ist. Konkret betrachten wir die Ableitung des Logarithmus von f (*Dlog Padé*). Hat man

$$f(\delta) = \delta^\gamma \sqrt{-\ln\delta + h(\alpha_0)} \ , \tag{2.27}$$

so erhält man

$$\frac{f'}{f} = \frac{1}{\delta}\left(\gamma - \frac{1}{2}\frac{1}{h(\alpha_0) - \ln\delta}\right) \ . \tag{2.28}$$

Nach der Entwicklung der rechten Seite um die Stelle $\delta^2 = 1$, bekommt man einen Ausdruck der Form $f'/f = P(\delta^2)/\delta$. Dabei ist $P(\delta^2)$ ein Polynom neunten Grades in δ^2, welches die offensichtliche Symmetrie $\delta \leftrightarrow -\delta$ des Hamiltonoperators (2.1) berücksichtigt. Außerdem ist in Gl. (2.28) mit $\delta = 0$ der Ort der Singularität festgelegt. Als letztes machen wir die Ersetzung $\alpha_0 \to \alpha_0(1-\delta^2)$, um eine Entwicklung um den Limes isolierter Dimere durchführen zu können. Der Wert von $P(0)$ ist in dieser Approximation dann die Abschätzung für den kritischen Exponenten γ. Unter der Annahme, daß die Koeffizienten des Polynoms P, mit der nun berücksichtigten logarithmischen Korrektur, mit steigender Ordnung rasch abfallen, wird die Konstante $h(\alpha_0)$ so bestimmt, daß der Koeffizient des Terms neunter Ordnung verschwindet. Auf diese Weise fanden wir bei nicht vorhandener Frustration $\gamma = 0.68$ und $h = 5.65$. Bei kritischer Frustration ergibt sich $\gamma = 0.56$ und $h = 2.50$.

Die gute Übereinstimmung des Exponenten mit dem erwarteten Wert bei Abwesenheit von Frustration zeigt, daß die logarithmischen Korrekturen in der Tat für die Schwierigkeiten bei der Bestimmung des kritischen Exponenten aus störungstheoretischen Daten verantwortlich zeichnen. Das unbefriedigende Ergebnis für den Exponenten bei kritischer Frustration läßt sich auf die sicherlich nicht optimale Methode zur Bestimmung der Konstanten h zurückführen. Es wäre sehr hilfreich, wenn man Aussagen über die Energielücke als Funktion von δ und $\alpha - \alpha_c$ hätte, die auch Bereiche im überkritischen Regime beinhalten.

Als ein Ausblick sollte hier auf die Methode der *Partial Differential Approximants* (PDA) [29] hingewiesen werden. Sie erlaubt es, Reihenentwicklungen in mehreren Variablen zu approximieren (hier wären das λ und α), indem die vorliegenden Polynome in mehreren Unbekannten an partielle Differentialgleichungen angepaßt werden. Dadurch könnten die Informationen *sämtlicher* Koeffizienten, auch der von α, benutzt werden. Außerdem ist die Methode gut geeignet, multisinguläres Verhalten, wie es bei uns an der Stelle $(\delta = 0, \alpha_0 = 0.241)$ vorliegt, zu approximieren, weswegen diese Methode hier sicherlich zu einem besseren Verständnis beitragen könnte.

2.4.3 Dispersion

Die Ein-Magnon-Dispersion $\omega(k)$ für die antiferromagnetische Heisenbergkette ist durch Gl. (2.18) gegeben. Die Hüpfamplituden a_i sind im Anhang B angegeben. Für $\alpha_0 = 0$ können diese mit denen aus Ref. [17] verglichen werden. Wir finden wieder volle Übereinstimmung.

Im folgenden werden verschiedene Herangehensweisen vorgestellt, um die Dispersion aus den von uns berechneten Koeffizienten zu bestimmen. Die direkte

Vorgehensweise entspricht wieder dem unmittelbaren Substituieren von J, λ und α in Gl. (2.18) gemäß Gl. (2.2). Per Konstruktion reproduzieren die daraus resultierenden Kurven bei $k = 0$ die Energielücken „direktes Polynom" des letzten Abschnitts. Dort hatten wir allerdings bemerkt, daß es zu einer deutlichen Verbesserung der Darstellungen kommt, wenn man geeignetes Vorwissen in der Auswertung berücksichtigt. Es ergibt sich also die Frage, wie die so extrapolierten Resultate der Energielücke verwendet werden können, um bessere Darstellungen der Dispersion zu erreichen.
Motiviert durch das Verhalten von lorentzinvarianten Systemen, bei denen sich die Dispersion von $\omega = v_{\mathrm{S}}k$ (v_{S} ist die Spinwellengeschwindigkeit) zu $\omega \propto \sqrt{\Delta^2 + (v_{\mathrm{S}}k)^2}$ verschiebt, sobald sich eine Energielücke Δ öffnet, benutzen wir das folgende Verfahren. Zunächst substituieren wir J und λ in Gl. (2.18), was uns auf einen Ausdruck führt, den wir $\omega_{\mathrm{direkt}}(k;\alpha)$ nennen wollen. Dann überführen wir die Differenz

$$\omega^2_{\mathrm{diff}}(k) := \omega^2_{\mathrm{direkt}}(k;\alpha) - \omega^2_{\mathrm{direkt}}(k=0;\alpha) \tag{2.29}$$

in eine Taylorentwicklung um $\delta = 1$ bis einschließlich zehnter Ordnung, wobei α wie ein fester Parameter behandelt wird. Danach wird α gemäß Gl. (2.2) substituiert. Die Dispersion berechnen wir schließlich durch den quadratischen Mittelwert

$$\omega(k) = \sqrt{\Delta^2(\alpha_0,\delta) + \omega^2_{\mathrm{diff}}(k)}\ . \tag{2.30}$$

Für den Fall $\delta = \alpha_0 = 0$ wird das Ergebnis dieses Vorgehens in Abb. 2.12 dargestellt. Dort wird die Kurve mit dem aus dem Bethe-Ansatz gewonnenen exakten Resultat [30] und mit dem Ergebnis $\omega_{\mathrm{direkt}}(k)$, das man ohne Berücksichtigung der korrigierten Energielücke erhält, verglichen. Die Abbn. 2.13, 2.14 und 2.15 zeigen die entsprechenden Ergebnisse für verschiedene Werte von δ und α_0. Die Übereinstimmung mit dem exakten Resultat in Abb. 2.12 ist exzellent. Man erkennt, daß der quadratische Mittelwert (Gl. 2.30) nur für kleine k eine Rolle spielt. Sobald eine endliche Dimerisierung vorliegt, z.B. $\delta \geq 0.05$ in Abb. 2.13, wird der Unterschied zwischen $\omega(k)$ nach Gl. 2.30 und $\omega_{\mathrm{direkt}}(k)$ vernachlässigbar klein und wir zeigen jeweils nur das verbesserte Ergebnis $\omega(k)$.
Begibt man sich in das Regime größerer Frustration ($\alpha_0 > 0.4$), so muß das oben beschriebene Berechnungsverfahren geringfügig abgeändert werden. In Abb. 2.16 werden drei unterschiedliche Herangehensweisen zur Berechnung der Dispersion $\omega(k)$ miteinander verglichen. Die gestrichelte Linie mit dem Namen „$\omega_{\mathrm{direkt}}(k)$ & Taylor" erhält man, indem man $\omega_{\mathrm{direkt}}(k;\alpha)$ in eine Taylorreihe um $\delta = 1$ entwickelt und α dabei festhält. Danach substituiert man α gemäß

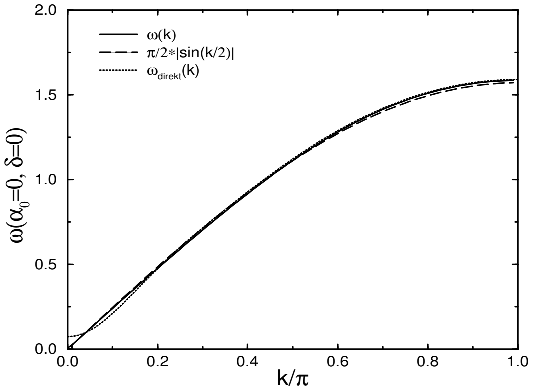

Abbildung 2.12: Dispersion ω gegen Wellenzahl k ohne Frustration und Dimerisierung. Die gestrichelte Linie ist das exakte Ergebnis durch Bethe Ansatz. Die gepunktete Linie zeigt $\omega_{\text{direkt}}(k)$.

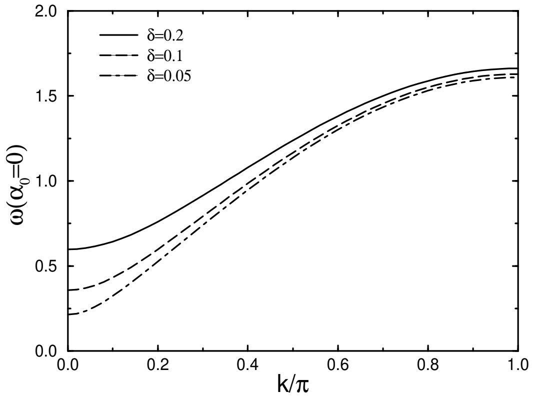

Abbildung 2.13: Dispersion ω gegen Wellenzahl k bei $\alpha_0 = 0$ und verschiedenen Dimerisierungen.

Gl. (2.2) und setzt $\delta = 0$ und $\alpha_0 = 0.5$. Die resultierende Kurve ist für kleine Wellenzahlen k weit weg vom erwarteten Verhalten. Um gute Werte für die Energielücke zu bekommen, ist es notwendig, die Wurzeldarstellung (2.30) zu benutzen. Auf der anderen Seite wissen wir, daß das exakte Ergebnis für die Stelle $k = \pi$ Eins ist [31, 32]. Benutzt man die Wurzeldarstellung (2.30) wie oben beschrieben, erhält man die punkt-gestrichelte Kurve „sqrt & Taylor“ in Abb. (2.16). Die Energielücke wird jetzt wieder sehr gut reproduziert, aller-

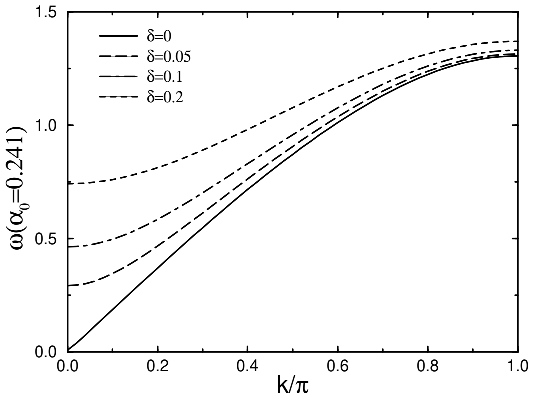

Abbildung 2.14: Dispersion ω gegen Wellenzahl k bei $\alpha_0 = 0.241$ und verschiedenen Dimerisierungen.

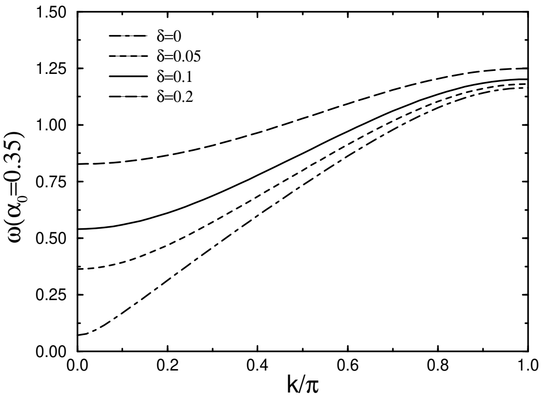

Abbildung 2.15: Dispersion ω gegen Wellenzahl k bei $\alpha_0 = 0.35$ und verschiedenen Dimerisierungen.

dings ist die Übereinstimmung beim Dispersionsmaximum nicht mehr so gut. Es wäre also schön, wenn man ein Verfahren an der Hand hätte, das die Vorteile der beiden eben besprochenen Methoden vereint. Eine überzeugende Interpolation wird erreicht, indem man die Taylorentwicklung im Wurzelverfahren durch eine entsprechende $[5,5]$ Padé-Approximation ersetzt. In Abb. 2.16 wird das Ergebnis als durchgezogene Linie „sqrt & Padé“ dargestellt. Abb. 2.17 zeigt die so gewonnenen Ergebnisse bei endlicher Dimerisierung.

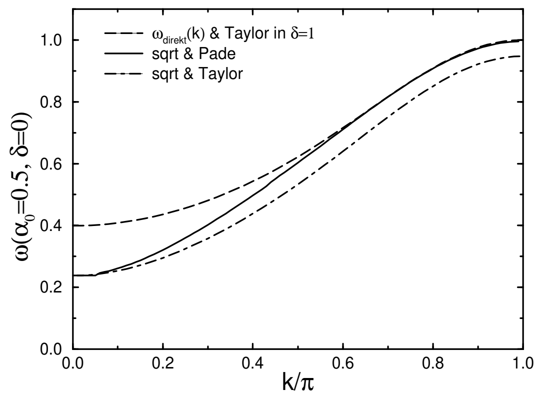

Abbildung 2.16: Dispersion ω gegen Wellenzahl k bei $\alpha_0 = 0.5$ und $\delta = 0$. Dargestellt sind die Resultate dreier verschiedener Verfahren, die Dispersion aus den von uns gewonnenen Koeffizienten zu berechnen.

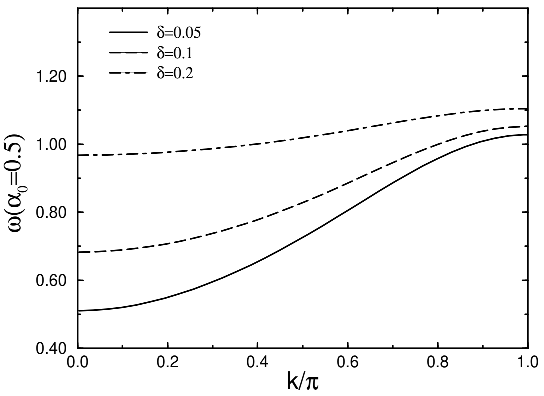

Abbildung 2.17: Dispersion ω gegen Wellenzahl k bei $\alpha_0 = 0.5$ und verschiedenen Dimerisierungen. Das benutzte Verfahren ist das, was in Abb. 2.16 „sqrt & Padé“ genannt wird.

Vollständigkeitshalber erwähnen wir, daß das Padé-Verfahren im $\alpha_0 < 0.4$ Regime genauso gut funktioniert wie das Taylor-Verfahren. Das Padé-Verfahren reproduziert z.B. die Ergebnisse in Abb. 2.15 mit weniger als 1% Abweichung. Das bedeutet, daß es im $\alpha_0 < 0.4$ Fall nicht notwendig ist, das aufwendigere Padé-Verfahren zu benutzen. Es im Bereich größerer Frustration zu benutzen, bedeutet aber nicht, daß eine Inkonsistenz vorliegt. Insofern ist unsere

Vorgehensweise bei großer Frustration vollkommen konsistent mit unserer Darstellung bei kleineren Frustrationen.
Die Beobachtung, daß sich die Dispersion bei starker Frustration bei $k \approx 0$ anders verhält als bei $k \approx \pi$, kann man auf Grund einer physikalischen Argumentation verstehen. Dazu betrachten wir zunächst das Majumdar-Ghosh Modell, also keine Dimerisierung und $\alpha_0 = 1/2$. Die tiefliegenden Anregungen dieses Modells sind durch asymptotisch freie $S = 1/2$ Spinonen gegeben [33, 34, 35, 32]. Das bedeutet, daß in der Umgebung des Dispersionsminimums der Limes $\delta \to 0$ nicht den Dispersionsast einer wohldefinierten Ein-Magnon-Anregung darstellt, wie in unserem störungstheoretischen Zugang angenommen wird. Vielmehr handelt es sich um die untere Bandkante eines Zwei-Spinon-Kontinuums. In dieser Hinsicht ähnelt die Situation der des Bereichs unterkritischer Frustration, weswegen eine entsprechende Extrapolation in der $k \approx 0$ Umgebung auch hier zu einem guten Ergebnis führt.
In der Nähe des Dispersionsmaximums hingegen dominiert die Spinonwechselwirkung, und selbst ohne vorhandene Dimerisierung kommt es zu gebundenen Zuständen. Der exakte Triplettzustand z.B. ist ein stark gebundener Zwei-Spinon-Zustand [31]. Eine variationelle Analyse zeigt, daß dieses gebundene Triplett unterhalb des Zwei-Spinon-Kontinuums in einem endlichen Intervall um $k = \pi$ existiert [33, 35, 32]. Es ist also vollkommen verständlich, daß der vom Limes lokaler Tripletts aus startende perturbative Ansatz gut um den Punkt $k = \pi$ herum funktioniert, wohingegen in der Gegend von $k = 0$ eine entsprechende Extrapolation notwendig wird. Die Padé-Approximation ist am besten geeignet, zwischen den beiden Bereichen – Bandkante bzw. echter Triplettast – zu interpolieren.
Unser Zugang stellt für den Bereich $\delta \geq 2\%$ zuverlässige und leicht zu verwendende Resultate bereit, die für die schnelle Analyse experimenteller Daten hervorragend geeignet sind. Für die verschiedenen berechneten physikalischen Größen wurden entsprechend angepaßte Extrapolationen durchgeführt, durch die wir den Bereich, in dem unseren Ergebnissen quantitativ vertraut werden kann, zu kleineren Dimerisierungen δ hin ausbauen konnten. Wie man in Abb. 2.10 erkennt, bricht unser störungstheoretischer Zugang bei $\delta = 0$ (also $\lambda = 1$) zusammen. Will man die vorgestellten Resultate verwenden, so sollten die diskutierten Beschränkungen berücksichtigt werden.

Kapitel 3

Anwendung II

In diesem Kapitel betrachten wir ein von Uhrig [3] vorgeschlagenes zweidimensionales Spinmodell für $CuGeO_3$ in der dimerisierten Phase. Wieder wollen wir die in Teil I der Arbeit hergeleitete Methode anwenden, um die Ein-Magnon-Dispersion dieses Modells zu bestimmen. Es zeigt sich, daß in der rechnergestützten Auswertung einige Ergebnisse des Kapitels 2 verwendet werden können (Abschnitt 3.2). Den großen Vorteil unserer Methode, die parameterabhängigen Ergebnisse, nutzen wir in Abschnitt 3.3, um eine Anpassung der Modellparameter an die von Regnault *et al.* [4] experimentell bestimmte magnetische Dispersion für $CuGeO_3$ vorzunehmen.

3.1 Zweidimensionales Spinmodell für $CuGeO_3$

In Abschnitt 2.1 wurden bereits einige Eigenschaften der Substanz $CuGeO_3$ vorgestellt. Dort haben wir argumentiert, daß $CuGeO_3$ in guter Näherung eindimensional modelliert werden kann, da die magnetische Austauschwechselwirkung in Kettenrichtung (das ist die c-Richtung, siehe Abb. 2.2 und 2.3) um etwa eine Größenordnung größer ist als die magnetische Dispersion in b-Richtung.
In diesem Kapitel soll die Ein-Magnon-Dispersion unter Berücksichtigung der Mehrdimensionalität von $CuGeO_3$ bestimmt werden. Bisweilen schreibt man die Abweichungen des Verhaltens von $CuGeO_3$ von der einfachen Heisenbergkette mit Nächstnachbar-Wechselwirkung unter Berücksichtigung der Phononen einer zusätzlichen antiferromagnetischen ketteninternen Übernächstnachbar-Wechselwirkung α zu [4, 36, 37, 38, 39]. Bislang konnte jedoch noch nicht eindeutig geklärt werden, welchen speziellen Wert diese Frustration α

für $CuGeO_3$ annimmt. Die zur Verfügung stehenden Meßdaten verschiedener physikalischer Größen von $CuGeO_3$ erlauben bisher keine einheitliche Festlegung der Parameter eindimensionaler Modelle. So erhalten Riera *et al.* [37] einen Wert von $\alpha = 0.36$, indem sie ein eindimensionales Modell an Meßdaten zur magnetischen Suszeptibilität von $CuGeO_3$ anpassen. Dabei berücksichtigen sie Phononen in einer adiabatischen Näherung. Allerdings finden Regnault *et al.* [4] durch Anpassung eines eindimensionales Modells an die bei tiefen Temperaturen gemessene magnetische Dispersion in c-Richtung einen Wert von $\alpha = 0.17$. Für die antiferromagnetische Kopplung J erhalten sie auf diese Art 10.6 meV. Kuroe *et al.* [40] bestimmen J durch Anpassung eines eindimensionalen Modells an Meßdaten zur magnetischen spezifischen Wärme von $CuGeO_3$ zu 21.5 meV.
Die Übernächstnachbar-Kopplung ist eine marginale Störung, die eine Lücke im Spinsystem erzeugt, sobald der kritische Wert $\alpha_c = 0.241$ überschritten wird [41, 42]. Die Hochtemperaturdaten zur magnetischen Suszeptibilität $\chi(T)$ [43, 44] sprechen für einen Wert oberhalb von α_c [37, 45], obwohl es keine Anzeichen für ein Spingap ohne alternierende Kopplung gibt [38]. Der durch Tieftemperaturverhalten von Regnault ermittelte Wert $\alpha = 0.17$ (siehe oben) hingegen liegt deutlich unterhalb des kritischen Werts α_c.
Die Dispersion in b-Richtung beträgt etwa 1/3, die in a-Richtung etwa 1/50 der Dispersion in c-Richtung. Betrachten wir daher zunächst die bc-Ebene. Bislang behandelt man die komplette Dispersion $\omega(\vec{q})$ zumindest qualitativ als eine Summe zweier unabhängiger Beiträge $\omega(\vec{q}) \approx \omega_b(q_b) + \omega_c(q_c)$, was auf die Ergebnisse in Ref. [46] (darin besonders die Abb. 2) und in Ref. [47] (Abb. 9) führt.
Mit Uhrig [3] stellen wir fest, daß die Spin-Spin-Kopplungen senkrecht zu den Ketten in c-Richtung die Dispersion *entlang* der Ketten auf eine nichttriviale und nichtkonstante Art und Weise beeinflussen. Experimente mit elastischer Neutronenstreuung liefern Hinweise [48, 49], daß sich das Dimerisierungsmuster um einen Platz von einer Kette zur nächsten verschiebt. Uhrig [3] schlägt deswegen das in Abb. 3.1 dargestellte zweidimensionale Spinmodell für $CuGeO_3$ vor. Die dicken Linien repräsentieren die Dimere (J ist auf Eins gesetzt). Die anderen Linien (dünn, gestrichelt, gepunktet) repräsentieren die übrigen schwächeren Kopplungen ($\lambda, \mu < 1$). Die Linie λ ist die schwache Wechselwirkung in der dimerisierten Kette, μ ist die Zwischenkettenkopplung, $\mu\beta$ ist eine mögliche Übernächstnachbar-Kopplung zwischen den Ketten, und $\lambda\alpha$ ist die weiter oben diskutierte Frustration innerhalb der Ketten. Es sei erwähnt, daß eine einzelne Kette in c-Richtung dem in Abschnitt 2.1 besprochenen Modell entspricht. Der mikroskopische Superaustauschpfad für μ und $\mu\beta$ ist Cu-O2-O2-Cu in b-Richtung (siehe Abb. 2.2). Da von einem der O2

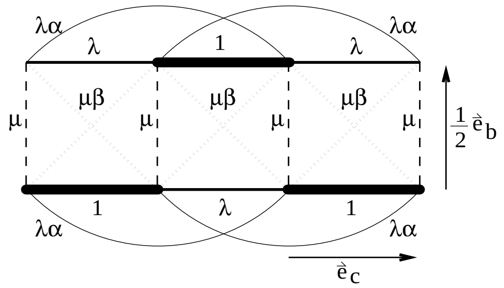

Abbildung 3.1: Dimerisiertes 2d Spinmodell für CuGeO$_3$. Dargestellt ist ein Segment der bc-Ebene. Die größte Kopplung (J) ist auf Eins gesetzt. Die schwächeren Kopplungen werden wie eingezeichnet parametrisiert.

aus zwei Cu-Ionen mit verschiedenen c-Koordinaten erreicht werden können, gibt es die Möglichkeit zu einem direkten Superaustausch (μ) oder einem Superaustausch mit einer Verschiebung entlang der c-Achse ($\mu\beta$). Man erwartet $|\beta| \approx 0.5$, da es zwei Pfade für den direkten Superaustausch und einen für jeden verschobenen Superaustausch gibt.
Die in Teil I der vorliegenden Arbeit vorgestellte perturbative Methode soll nun verwendet werden, um die Ein-Magnon-Dispersion dieses Spinmodells zu berechnen. Wie in Kapitel 2 gesehen, werden wir ein Ergebnis in Form von Polynomen in den Parametern J, λ, α, μ und β erhalten. Dieses Resultat wird anschließend an experimentelle Daten einer inelastischen Neutronenstreuung für die Ein-Magnon-Dispersion angepaßt [4], woraus wir Werte für die Parameter des Modells ableiten können. Konkret rechnen wir mit leicht modifizierten Kopplungen, bei denen μ und $\mu\beta$ mit λ multipliziert worden sind. Nun kann aus allen Termen, die wir als Störung auffassen, global der Faktor λ herausgezogen werden. Wieder verwenden wir den Limes starker Dimerisierung ($\lambda \to 0$) als Startpunkt für unseren störungstheoretischen Zugang. Der ungestörte Teil H_0 und der Störteil H_S des zu untersuchendenHamiltonoperators $H = H_0 + \lambda H_\mathrm{S}$ lassen sich angeben als

$$H_0 = \sum_{l,n} \left[\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \right] \quad (3.1)$$

$$H_\mathrm{S} = \sum_{l,n} \left[\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \right]$$

$$+\mu \sum_{l,n} \left[\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \right]$$

$$
\begin{aligned}
&+\alpha \sum_{l,n} \Big[\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n-2)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \\
&\qquad +\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n-2)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \\
&\qquad +\mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \Big] \\
&+\mu\beta \sum_{l,n} \Big[\mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \\
&\qquad +\mathbf{S}_{(2n-1)\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} + \mathbf{S}_{2n\vec{e}_c+l\vec{e}_b} \cdot \mathbf{S}_{(2n+1)\vec{e}_c+(l+\frac{1}{2})\vec{e}_b} \Big] \,, \qquad (3.2)
\end{aligned}
$$

wobei alle Energien implizit in Einheiten von J gemessen werden. Schematisch ist dies gleichbedeutend mit (siehe Linien in Abb. 3.1)

$$
\begin{aligned}
H_0/J &= \sum \mathbf{S} \boldsymbol{-\!\!-} \mathbf{S} \\
H_S/J &= \sum \mathbf{S} \boldsymbol{-\!\!-} \mathbf{S} + \alpha \sum \mathbf{S} - \mathbf{S} + \mu \sum \mathbf{S} \text{ - - - } \mathbf{S} + \mu\beta \sum \mathbf{S} \cdots\cdots \mathbf{S} \,. \qquad (3.3)
\end{aligned}
$$

Durch die Substitution

$$
\mu \to \frac{\mu}{\lambda} \qquad (3.4)
$$

gelangt man zum ursprünglichen Modell zurück.
Für $\lambda = 0$ ist der Grundzustand gegeben durch lokale Singuletts auf den Dimeren. Ein Magnon ist ein einzelnes lokales entartetes Triplett auf einem der Dimere. Es zeigt sich, daß für $N = 2$ der durch Gln. (3.1, 3.2) gegebene Hamiltonoperator die Bedingungen (A) und (B) des Abschnitts 1.2 erfüllt. Wir dürfen also den effektiven Hamiltonoperator H_{eff} (1.52) aus Abschnitt 1.2 verwenden. Wie die Berechnungen zur Triplettdispersion konkret ausgeführt werden können, wird im folgenden Abschnitt dargestellt. Dabei können einige Ergebnisse des Kapitels 2 übernommen werden. Eine Auswertung der Resultate findet man in Abschnitt 3.3.

3.2 Implementierung

Unser Ziel ist es, die Berechnungen der Ein-Magnon-Dispersion unter Verwendung des effektiven Hamiltonoperators H_{eff} (Gl. (1.52)) auf einem Rechner zu implementieren. Dabei wollen wir möglichst viele der in Kapitel 2 angestellten Überlegungen verwenden.

Um die Ein-Magnon-Dispersion berechnen zu können, müssen wir den Unterraum betrachten, in dem genau ein Singulett zu einem Triplett angeregt ist. Wie in Abschnitt 2.2 gesehen, wird sich das Triplett unter der Wirkung von H_{eff} durch das Gitter bewegen. Dabei gilt es, Hüpfprozesse von Dimer zu Dimer zu erfassen. Um die Topologie dieser Prozesse besser überblicken zu können, betrachtet man ein effektives Gitter, in dem ein Dimer (bestehend aus zwei Plätzen des ursprünglichen Gitters) durch einen einzigen Platz dargestellt wird; siehe Abb. 3.2. Die gestrichelten Linien entsprechen den Hüpfprozessen

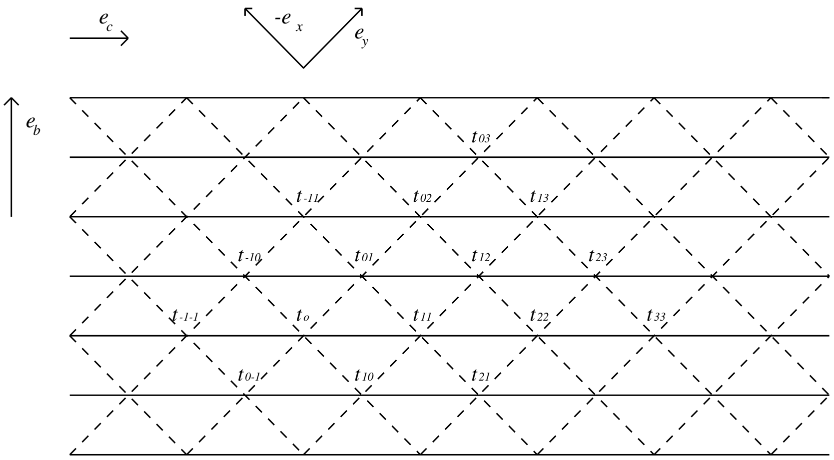

Abbildung 3.2: Das effektive Gitter, das man erhält, wenn man jedes Dimer als einen einzelnen Gitterplatz auffaßt. Die Hüpfelemente t_{ij} beziehen sich auf Hüpfprozesse, die vom Platz t_0 aus starten.

$\propto \mu$, während die durchgezogenen Linien denen $\propto \lambda$ (im ursprünglichen Modell Abb. 3.1) entsprechen. Eine natürliche Einheitszelle wird durch die Vektoren $\vec{e}_x$ und $\vec{e}_y$ aufgespannt. Die gestrichelten Linien ergeben ein Quadratgitter, zu dem die durchgezogenen Linien jeweils eine Diagonale hinzufügen.
Analog zur Gl. (2.14) des Abschnitts 2.2 haben wir hier

$$H_{\text{eff}}|\mathbf{r}\rangle = J \sum_{\mathbf{r}'} t_{\mathbf{r}'} |\mathbf{r} + \mathbf{r}'\rangle \ , \tag{3.5}$$

wobei $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ Vektoren des effektiven Gitters in Abb. 3.2 sind. Der Zustand $|\mathbf{r}\rangle$ ist der Zustand des Gitters, in dem das Dimer bei $\mathbf{r}$ im Triplettzustand ist und alle übrigen Dimere im Singulettzustand sind. Die magnetische Quantenzahl des Triplettzustands interessiert hier nicht. Das Gitter besitzt Translationsinvarianz, und die durch den Gitterimpuls $\mathbf{k}$ charakterisierten Eigenzustände des Hamiltonoperators H_{eff} sind gegeben durch

$$|\mathbf{k}\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{kr}} |\mathbf{r}\rangle \; . \tag{3.6}$$

Analog zu den Überlegungen des Abschnitts 2.2 rechnet man nach, daß die Ein-Magnon-Dispersion gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \omega(\mathbf{k}) &= \langle \mathbf{k} | \, H_{\text{eff}} | \mathbf{k} \rangle - E_0 && (3.7) \\ \Rightarrow \frac{\omega(\mathbf{k})}{J} &= t_{\mathbf{0}} - \frac{E_0}{J} + \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{0}} t_{\mathbf{r}} \cdot \cos(k_1 r_1 + k_2 r_2) \; , && (3.8) \end{aligned}$$

wobei wir $\mathbf{r} = r_1 \cdot \mathbf{e}_1 + r_2 \cdot \mathbf{e}_2$ mit $\mathbf{e}_i$ als geeigneten elementaren Vektoren des effektiven Gitters (Abb. 3.2) und $\mathbf{k} = k_1 \cdot \mathbf{f}_1 + k_2 \cdot \mathbf{f}_2$ mit $\mathbf{f}_i$ den entsprechenden dualen Vektoren des reziproken Gitters annehmen.
Bevor wir die für H_{eff} benötigten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren T_n, $n \in \{0, \pm 1, \pm 2\}$ aus H_{S} (Gl. (3.2)) bestimmen, stellen wir zunächst einige Überlegungen zu der Kodierung der Zustände an.
Wie im Abschnitt 2.3 wollen wir die verschiedenen Zustände, die das Gitter im Verlauf der Rechnung annehmen kann, durch einen `integer X` darstellen. Allerdings nötigt uns die Zweidimensionalität des Problems einige Erweiterungen der in Tabelle 2.2 gegebenen Kodierung auf. Zunächst stellt man fest, daß es unter Umständen nicht ausreichend ist, einen vier Bytes langen gewöhnlichen `integer` zur Kodierung zu verwenden. Wie in Abschnitt 2.3 ausgeführt, kann ein solcher `integer` maximal 16 Dimere verwalten. Man kann sich leicht überlegen, daß hier weit mehr Dimere in der Rechnung zu berücksichtigen sind, falls man entlegenere Hüpfamplituden t_{ij} bestimmen will (siehe Abb. 3.2) oder zu höheren Ordnungen in λ übergeht, da sich damit auch die Zahl der zu berücksichtigenden Hüpfprozesse erhöht. Zu diesem Zweck wurde die C++ Klasse `very-long-integer` entwickelt, in der die elementaren Vergleichsoperatoren „$<$ (=)“, „$>$ (=)“, die binären Verschiebeoperatoren „$<<$“, „$>>$“ sowie die binärlogischen Operatoren `AND` „&“, `OR` „|“ und `NOT` „!“ überladen wurden, um sie problemlos auf den neuen Datentyp anwenden zu können. Im wesentlichen setzt sich ein `very-long-integer` aus mehreren elementaren `integern` zusammen, die auf geeignete Weise untereinander verbunden sind, um z.B. die Bitverschiebung von einem `integer` in den sich anschließenden zu ermöglichen. Die Anzahl der zu verwendenden `integer` pro `very-long-integer` ist variabel gehalten, so daß der neue Datentyp an den Umfang der Rechnung angepaßt werden kann.
In Analogie zu den Erläuterungen in Abschnitt 2.2 muß für die Berechnung

einer festgelegten Hüpfamplitude t_{ij} in der vorgegebenen Ordnung k nur ein bestimmtes Cluster des effektiven Gitters (Abb. 3.2) berücksichtigt werden. Dieses Cluster muß alle Dimere und Verbindungen enthalten, die in einem Dimer-zu-Dimer Hüpfprozeß der Länge k involviert sein könnten, wenn dieser Prozeß bei einem vorgegebenen Dimer startet (z.B t_0) und beim Dimer t_{ij} endet. Betrachtet man Abb. 3.2 und beginnt man mit einem Triplett auf Dimer t_0, so setzt sich das Cluster zur Bestimmung von t_{ij} in Ordnung k aus all den Dimeren und deren Verbindungen untereinander zusammen, die auf sämtlichen Wegen der Länge $\leq k$ liegen, welche man in diesem Gitter gehen kann, um von t_0 nach t_{ij} zu gelangen. Da das Auffinden dieser Wege in höheren Ordnungen k extrem aufwendig werden kann, wurde eigens zum Zweck der Clusterbestimmung eine C++ Routine geschrieben, die systematisch alle Wege durchprobiert und so die jeweiligen Cluster bestimmt. Es wurde eine graphische Schnittstelle zu dieser Routine entwickelt, die eine visuelle Überprüfung der Cluster ermöglicht. Die Abbn. 3.3 und 3.4 zeigen rechnererzeugte Cluster. In Abb. 3.3 wird das zur Bestimmung von t_{11} benötigte Cluster dargestellt, falls man Hüpfprozesse der Länge drei zuläßt, also eine Rechnung in dritter Ordnung in λ vornimmt. Es läßt sich leicht einsehen, daß alle möglichen Wege berücksichtigt sind. Dagegen fällt das in Abb. 3.4 dargestellte Cluster für t_{13} in achter Ordnung deutlich komplizierter aus. Die Clusterbestimmungsroutine

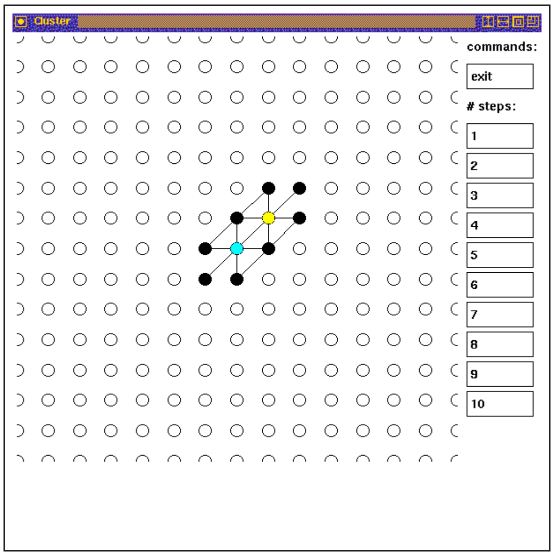

Abbildung 3.3: Rechnererzeugtes Cluster, das zur Bestimmung von t_{11} in Ordnung $k = 3$ benötigt wird. Dimere sind durch Kreise dargestellt. Ausgefüllte Kreise sind im Cluster zu berücksichtigende Dimere. Gleiches gilt für die ausgezogenen Verbindungen. Das Ausgangsdimer befindet sich in der Mitte der Darstellung und ist dunkelgrau markiert. Das Zieldimer ist hellgrau.

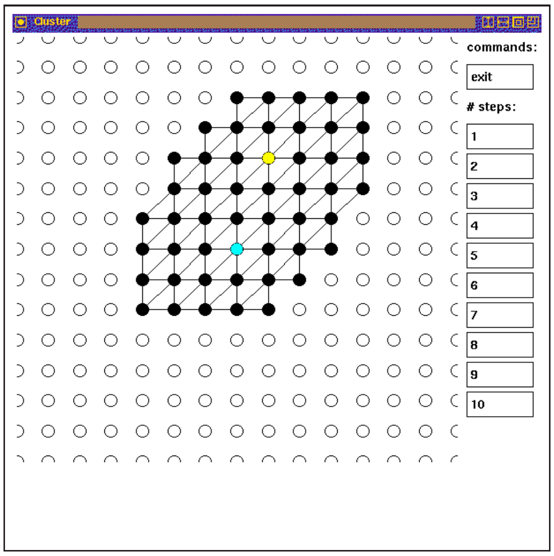

Abbildung 3.4: Computergeneriertes Cluster, das zur Bestimmung von t_{13} in Ordnung $k = 8$ benötigt wird. Weitere Erläuterungen siehe Abb. 3.3

kann leicht abgeändert und für andere Gitter angewendet werden.
Als letzten Punkt in der Erweiterung der Zustandskodierung müssen wir einen Weg finden, die Topologie des Gitters zu berücksichtigen. Jedes einzelne Dimer soll durch zwei Bits eines Datenbausteins `X` des Typs `very-long-integer` dargestellt werden. Dabei muß beachtet werden, welche Dimere untereinander verbunden sind. Wir müssen eine Abbildung finden, die das zweidimensionale Gitter auf den eindimensionalen Datenbaustein `X` abbildet. Zu diesem Zweck werden alle zu berücksichtigenden Dimere einer bestimmten t_{ij}-Berechnung (siehe Clusterbestimmung weiter oben) durchnumeriert. Das Dimer mit dem größten i-Index und dem größten j-Index ist Dimer Nummer Eins. Der Rest wird nach fallenden i- und $j-$Indizes sortiert. Für das Cluster in Abb. 3.3 erhält man somit die Reihenfolge (t_0 wird geschrieben als t_{00}) t_{22}, t_{21}, t_{12}, t_{11}, $\ldots$, t_{-1-1}. In dieser Reihenfolge werden die Dimere in `X` dargestellt. Hier würden also die untersten beiden Bits von `X` das Dimer t_{22}, die nächsthöheren beiden das Dimer t_{21} darstellen und so weiter. Um nun die Kopplungen unter den Dimeren kodieren zu können, wird für jedes Cluster ein zweidimensionales `integer`-Feld angelegt, das die Bedeutung einer Adjazenzmatrix hat. Dessen erste Spalte enthält die Nummern der Dimere, mit denen Dimer Nummer Eins eine Verbindung $\propto \lambda\alpha$ nach rechts, eine $\propto \mu\beta$ nach rechts oben und eine $\propto \mu\beta$ nach rechts unten hat (die Richtungen „rechts“, „unten“ und „oben“ beziehen sich auf Abb. 3.2). In der zweiten Spalte werden die Verbindungen des zweiten Dimers notiert. Der Eintrag Null besagt, daß in dieser Richtung keine Verbin-

Dimer Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\propto \lambda\alpha$ rechts	0	0	0	1	2	3	4	5	6	7
$\propto \mu\beta$ rechts oben	0	0	0	3	4	0	6	7	0	0
$\propto \mu\beta$ rechts unten	0	0	0	2	0	4	5	0	7	0

Tabelle 3.1: Beispiel für eine Adjazenzmatrix (hier konkret die des Clusters in Abb. 3.3). Mit ihrer Hilfe können sämtliche Verbindungen, welche die durch das eindimensionale `X` kodierten Dimere untereinander haben, rekonstruiert werden. Für eine eindeutige Erfassung aller Verbindungen müssen nur drei der sechs möglichen Verbindungen, die von einem Dimer ausgehen können, notiert werden. Die Richtungen „rechts", „unten" und „oben" beziehen sich auf Abb. 3.2

dung vom entsprechenden Dimer unterhalten wird. Auf diese Weise werden sämtliche Verbindungen genau einmal berücksichtigt. Für das in Abb. 3.3 dargestellte Cluster erhält man die in Tabelle 3.1 aufgeführte Adjazenzmatrix.

Kommen wir zu der Implementierung der T_n-Matrizen. Zur Berechnung der Ein-Magnon-Dispersion durch Gl. (3.8) benötigen wir die Hüpfamplituden $t_{\mathbf{r}} = t_{ij}$, die wir aus Gl. (3.5) bestimmen wollen. Wie in Abschnitt 2.2 konzentrieren wir uns zunächst auf die elementaren Prozesse, in denen nur zwei Dimere zu berücksichtigen sind. In Tabelle 2.1 wird die Wirkung der durch Gl. (2.9) definierten Operatoren $\mathcal{T}_n$, die diese elementaren Prozesse darstellen, zusammengefaßt. Durch eine Spinaustauschüberlegung können wir Prozesse, die die Frustration mit einbeziehen, auf die Operatoren $\mathcal{T}_n$ reduzieren (Gln. (2.11)), und so schließlich die Operatoren T_n, die auf die gesamte Kette wirken, herleiten (Gln. (2.12)).
Betrachten wir nun Abb. 3.1 etwas genauer. Man erkennt, daß zwei verschiedene Dimer-Dimer Prozesse (mit Frustration) zu berücksichtigen sind. Zum einen finden man die Prozesse entlang der c-Richtung, die vollkommen identisch mit denen durch die Gln. (2.9, 2.11) beschriebenen sind. Zum anderen bekommt man einen weiteren solchen Prozeß für benachbarte Dimere mit unterschiedlichen b-Positionen. Allerdings kann dieser Prozeß durch den ersten dargestellt werden, wenn man die Substitutionen $\mu \to \lambda$ und $\mu\beta \to \lambda\alpha$ vornimmt (Abb. 3.1). Beide Prozesse sind topologisch äquivalent. Die von uns gewählte Kodierung der Zustände ermöglicht es uns herauszufinden, welcher der beiden verschiedenen Dimer-Dimer Prozesse auf das aktuell zu untersuchende Dimerpaar anzuwenden ist.
Mit den bisher getroffenen Erweiterungen kann der in Abschnitt 2.3 besprochene Algorithmus zur Berechnung der Wirkung von H_{eff} (Gl. (1.52)) auf einen Zustand, in dem genau ein Singulett zu einem Triplett angeregt ist, auch hier

angewendet werden. Zu ergänzen bleibt lediglich die Implementierung der T_n, die wir in den sechs Schritten auf Seite 46 zusammengefaßt haben. Wir geben die veränderte Zusammenfassung der T_n-Implementierung an:

(i) Der Gitterzustand ist kodiert durch einen Datenbaustein `X` und der zum aktuell betrachteten Cluster gehörenden Adjazenzmatrix $\underline{M}$, in der sämtliche Verbindungen aller D zu berücksichtigenden Dimere untereinander eingetragen sind. Wir führen eine Schleifenvariable

$$\mathtt{p} \in \{1, 2, \dots, D\} \tag{3.9}$$

ein, so daß `p`=1 auf die erste Spalte in $\underline{M}$, also auf alle Verbindungen, die Dimer Eins unterhält, verweist. Genauso verweist `p`=2 auf alle Verbindungen des Dimers Zwei und so weiter.

(ii) Ist `p` einmal festgelegt, wird eine weitere durch die Variable `i`$\in \{1, 2, 3\}$ kontrollierte Schleife durchlaufen, wobei `i`=1 den ersten Eintrag adressiert, also die Nummer des Dimers, zu dem Dimer `p` eine Verbindung $\propto \lambda\alpha$ nach rechts unterhält. `i`=2 adressiert den zweiten ($\mu\beta$ nach rechts oben) und `i`=3 den dritten Eintrag ($\mu\beta$ nach rechts unten).

(iii) Einer weiteren Variable `p`' wird der Wert zugewiesen, den `i` gerade adressiert. Aktuell hat man also mit `p` die Nummer des einen und mit `p`' die Nummer des anderen Dimers vorliegen. Die Variable `i` kodiert die Art der Verbindung zwischen den beiden Dimeren.

(iv) Aus `p` und `p`' wird eine Bitmaske konstruiert, die die adressierten Dimere aus `X` herausschneidet. Dazu wird ein `very-long-integer` verwendet, in dem die Bits, die den Dimeren `p` und `p`' entsprechen, auf Eins gesetzt werden und alle anderen auf Null. Der Kombination `p`=1 und `p`'=3 entspricht z.B. die Bitmaske (1100110 . . . 0).

(v) Die Zahl

$$\{0, 1, \dots 15\} \ni x = (\text{Bitmaske})\ \mathtt{AND}\ (\mathtt{X}, \text{Kettenzustand}) \tag{3.10}$$

legt eindeutig fest, in welcher der 16 möglichen Zustandskombinationen sich das Dimerpaar (`p`,`p`') befindet. Folglich wird `x` in einer `SWITCH-CASE` Anweisung benutzt, um zu dem Programmblock zu springen, in dem der durch `i` festgelegte elementare Prozeß implementiert ist, was völlig analog zu der Implementierung in Abschnitt 2.3 ist.

(vi) Die `i`-Schleife wird solange wiederholt, bis alle Verbindungen des Dimers `p` abgehandelt wurden.

(vii) Die p-Schleife wird so lange wiederholt, bis alle Dimerspalten in $\underline{M}$ einmal abgearbeitet worden sind.

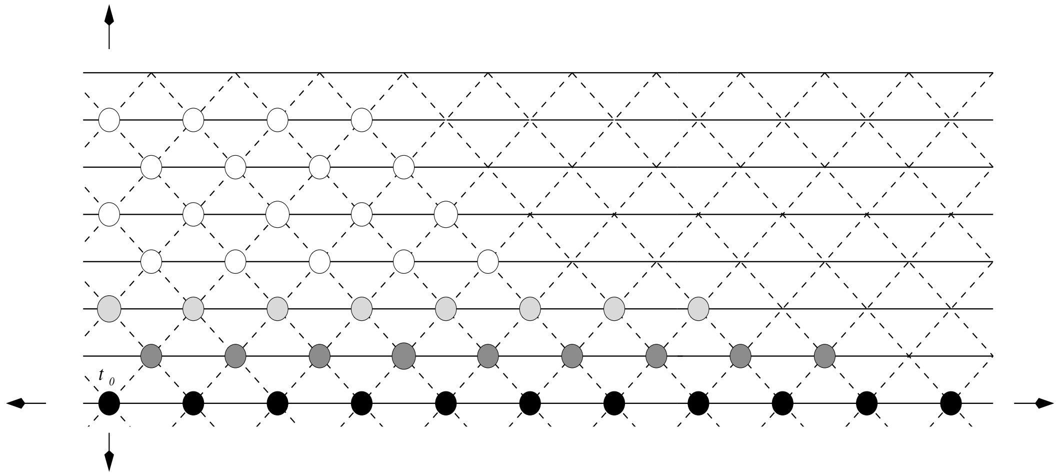

Abbildung 3.5: Zu allen eingezeichneten Dimeren (Kreise), die durch sechs Hüpfprozesse von t_0 aus erreichbar sind, wurden die entsprechenden Hüpfamplituden bis einschließlich sechster Ordnung in λ berechnet. Dabei wurden sämtliche Hüpfprozesse zugelassen. Die t_{ij}, die zu hellgrau, grau und schwarz gezeichneten Dimeren gehören, wurden um Terme $\propto \mu^2$ bis zu achter Ordnung in λ erweitert, sofern sie durch acht Hüpfprozesse erreicht werden können. Die t_{ij}, die zu grau und schwarz gezeichneten Dimeren gehören, wurden um Terme $\propto \mu^1$ bis zu neunter Ordnung in λ erweitert, sofern sie durch neun Hüpfprozesse erreicht werden können. Die t_{ij}, die zu schwarz gezeichneten Dimeren gehören, wurden durch die Ergebnisse aus der Kette bis zehnter Ordnung in λ erweitert ($\propto \mu^0$). Die Pfeile deuten die Symmetrieachsen an; eine Spiegelung der Figur um beide Achsen führt auf die Gesamtheit der von uns berücksichtigten Dimere in der Berechnung der Dispersion $\omega(\mathbf{k})$.

Der Rest der t_{ij}-Bestimmung durch Gl. (3.5) verläuft völlig analog zu der Vorgehensweise in Abschnitt 2.3.
Hat man die Hüpfamplituden einmal bestimmt, so berechnet sich die Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ in der zu $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y\}$ dualen Basis gemäß Gl. (3.8) zu

$$\begin{aligned}\frac{\omega(\mathbf{k})}{J} &= t_{00} + 2t_{11}\cos(k_x + k_y) + 2t_{22}\cos(2k_x + 2k_y) + \cdots \\ &+ 2t_{01}\left[\cos(k_x) + \cos(k_y)\right] + 2t_{02}\left[\cos(2k_x) + \cos(2k_y)\right] + \cdots \qquad (3.11) \\ &+ 2t_{-11}\cos(k_y - k_x) + 2t_{12}\left[\cos(k_x + 2k_y) + \cos(2k_x + k_y)\right] + \cdots \,.\end{aligned}$$

Darin ist $t_{00} = t_{\mathbf{0}} - E_0/J$ gesetzt worden. Die Indizierungen der t_{ij} beziehen sich auf die Abb. 3.2. Man beachte, daß die Symmetrie des effektiven Gitters

zu einer starken Vereinfachung der Berechnung führt. Der Punkt t_{11} beispielsweise hat eine doppelte Symmetrie und ist äquivalent zum Punkt t_{-1-1}. Der Punkt t_{01} hat sogar vierfache Symmetrie. Zur Bestimmung der Dispersion ist es also lediglich erforderlich, die Hüpfamplituden eines Quadranten mit t_0 in der Ecke zu berechnen (siehe Abb. 3.5).
Wechselt man in die zu $\{\mathbf{e}_b, \mathbf{e}_c\}$ duale Basis durch

$$\begin{aligned} k_x &= k_c + \frac{k_b}{2} \\ k_y &= k_c - \frac{k_b}{2} , \end{aligned} \tag{3.12}$$

so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\omega(\mathbf{k})}{J} &= t_{00} + 2t_{11}\cos(2k_c) + 2t_{22}\cos(4k_c) + \cdots \\ &+ 4t_{01}\left[\cos(k_c)\cos(k_b/2)\right] + 4t_{02}\left[\cos(2k_c)\cos(k_b)\right] + \cdots \\ &+ 2t_{-11}\cos(k_b) + 4t_{12}\cos(3k_c)\cos(k_b/2) + \cdots . \end{aligned} \tag{3.13}$$

In einem ersten Durchlauf bestimmen wir Hüpfamplituden bis einschließlich sechster Ordnung in λ. Wir führen die Rechnung für alle t_{ij} durch, die durch sechs Hüpfprozesse erreicht werden können (und in einem Quadranten liegen). Dabei müssen in einigen Clustern bis zu 38 Dimere und deren Verbindungen untereinander berücksichtigt werden. Dies führt zu einer erheblichen Steigerung sowohl der Laufzeit als auch des Speicherbedarf. Teilweise benötigen die Berechnung einer Hüpfamplitude in sechster Ordnung drei bis vier Tage und einen Speicher von bis zu 4 GB. Die Rechnungen konnten mit freundlicher Genehmigung des Regionalen Rechenzentrums der Universität zu Köln auf der dort vorhandenen SUN Ultra Enterprise 10000 durchgeführt werden.
Um die so erhaltenen Ergebnisse zu erweitern, führen wir Rechnungen in höheren λ-Ordnungen für Hüpfamplituden in der Nähe der Ausgangskette $t_0, t_{11}, t_{22}, \cdots$ durch. Da die ketteninternen Kopplungen deutlich größer sind als die Zwischenketten-Kopplungen, entschließen wir uns, die Erweiterungsrechnungen hauptsächlich in diesem Bereich durchzuführen. Die so berücksichtigte Anisotropie spiegelt sich in der Gestalt des in Abb. 3.5 dargestellten Clusters wieder. In den Erweiterungsrechnungen müssen Einschränkungen in der Art der zulässigen Prozesse gemacht werden. So bestimmen wir weitere Terme bis einschließlich λ^8 für die Hüpfamplituden $t_{-11}, t_{02}, t_{13}, \ldots$ (Übernächstnachbar-Kette), $t_{01}, t_{12}, t_{23}, \ldots$ (Nächstnachbar-Kette) und t_0, t_{11}, $t_{22}, \ldots$ (Ausgangskette). In der Berechnung dieser Terme werden maximal

Hüpfprozesse $\propto \mu^2$ zugelassen. Das heißt, wir erlauben nur solche Prozesse, in denen ein Hüpfen auf den gestrichelten Linien in Abb. 3.2 genau zweimal zugelassen wird. Den Amplituden t_{01}, t_{12}, $t_{23}, \ldots$ (Nächstnachbar-Kette) und t_0, t_{11}, $t_{22}, \ldots$ (Ausgangskette) fügen wir weitere Terme bis einschließlich λ^9 zu, zu deren Berechnung nur ein Hüpfprozeß auf den gestrichelten Linien zugelassen wird, die also $\propto \mu^1$ sind. Die Amplituden t_0, t_{11}, $t_{22}, \ldots$ der Ausgangskette können noch einmal um Terme bis λ^{10} und $\propto \mu^0$ durch die Ergebnisse für die Kette aus Kapitel 2 erweitert werden.

In Abb. 3.5 sind alle von uns für die Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ berücksichtigten Dimere aufgeführt. Den verschiedenen Graustufen entnimmt man, um welche Terme das erste Ergebnis in sechster Ordnung für die entsprechende Hüpfamplitude erweitert wurde. Durch Spiegelung an den eingezeichneten Achsen erhält man das Gesamtcluster, welches unseren Rechnungen zugrunde liegt.

Aufgrund ihrer extremen Länge ist es unmöglich, die Ergebnisse für alle t_{ij} anzugeben. Auf Anfrage hin werden sie aber gerne elektronisch zur Verfügung gestellt. Um eine Vorstellung zu vermitteln, wollen wir hier den noch recht übersichtlichen Ausdruck für t_{-13} angeben (das Ergebnis bezieht sich auf das durch die Gln. (3.1, 3.2) gegebene Modell)

$$
\begin{aligned}
t_{-13} = \Bigg[& \left(54\,{\beta_1}^2 - \frac{8543}{54}\,{\beta_1}^4 + \frac{91}{2}\,{\beta_1}^5 - \frac{15}{2}\,{\beta_1}^6 - \frac{16}{27}\,{\beta_1}^3 \right) \mu^6 \\
& + \left(78\,\alpha_1\,{\beta_1}^5 - 92\,\alpha_1\,{\beta_1}^3 - 156\,\alpha_1\,{\beta_1}^4 + \frac{2317}{27}\,{\beta_1}^4 \right) \mu^5 - \\
& \left(\frac{595}{4}\,{\alpha_1}^2\,{\beta_1}^4 - \frac{43}{27}\,\alpha_1\,{\beta_1}^3 + \frac{1165}{36}\,{\beta_1}^4 - \frac{23}{27}\,{\alpha_1}^2\,{\beta_1}^2 + 35\,\alpha_1\,{\beta_1}^4 \right) \mu^4 \Bigg] \\
& \overline{\lambda}^6 + \left[\left(\frac{4}{9}\,{\beta_1}^3 - 12\,{\beta_1}^4 + 6\,{\beta_1}^5 \right) \mu^5 - \frac{245}{8}\,\alpha_1\,{\beta_1}^4\,\mu^4 \right] \overline{\lambda}^5 - \frac{5}{2}\,{\beta_1}^4\,\mu^4\,\overline{\lambda}^4 \;. \qquad (3.14)
\end{aligned}
$$

Dabei wurden die Ersetzungen $\overline{\lambda} = \lambda/4$, $\alpha_1 = 1 - 2\alpha$ und $\beta_1 = 1 - 2\beta$ gemacht. Unsere Resultate können durch die mit einer Standard-Perturbationsrechnung bestimmten Ergebnisse [3] für die Hüpfamplituden überprüft werden. Nachdem an vier Termen in Ref. [3] Korrekturen vorgenommen wurden, decken sich die dort bis einschließlich dritter Ordnung in λ berechneten Resultate mit unseren. Außerdem kann die in Kapitel 2 berechnete Dispersion zur Überprüfung herangezogen werden. Setzt man $\mu = \beta = 0$, so geht das hier behandelte zweidimensionale Modell in die dort behandelte Spinkette über. Die ermittelten Terme bestehen auch diesen Test.

Im folgenden Abschnitt wird die von uns berechnete Ein-Magnon-Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ (Gl. (3.13)) an experimentelle Daten angepaßt. Wir werden versuchen, zuverlässige Intervalle für die Parameter des Spinmodells in Abb. 3.1 anzugeben.

3.3 Resultate und Parameterbestimmung

In diesem Abschnitt wollen wir die durch inelastische Neutronenstreuung von Regnault *et al.* [4] bestimmte Dispersion der magnetischen Anregung von $CuGeO_3$ benutzen, um die Parameter des Spinmodells in Abb. 3.1 festzulegen. Leider liegen für unser Modell keine theoretischen Voraussagen anderer Methoden über das Verhalten der Energielücke oder anderer hilfreicher Größen vor. Wir können also im Gegensatz zu Abschnitt 2.4 keine Extrapolationen an unseren Resultaten vornehmen. Allerdings machen an anderen Modellen durchgeführte Berechnungen Voraussagen über die Dimerisierung $\delta = (1-\lambda)/(1+\lambda)$ in $CuGeO_3$, die zwischen $\delta = 0.03$ und $\delta = 0.1$ liegen [4, 37, 38, 39, 50]. Wie wir in Abschnitt 2.4 gesehen haben, liefert unser störungstheoretischer Zugang für diese Werte der Dimerisierung noch qualitativ vertrauenswürdige Ergebnisse, so daß wir zuversichtlich sein können, auch ohne Extrapolationen glaubwürdige Werte für die Parameter zu erhalten. Außerdem werden unsere Ergebnisse zeigen, daß δ mit etwa 5% tatsächlich in dem Bereich liegt, in dem unsere Methode angewendet werden kann.
Die Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ berechnet sich durch Gl. (3.8), und wir können nun von einem großen Vorteil unserer Methode gegenüber anderen Verfahren Gebrauch machen. Nachdem wir die Substitution (3.4) ausgeführt haben, liegt die von uns berechnete Dispersion als Ausdruck in den zu bestimmenden Größen J, λ, α, μ und β vor, wie sie in Abb. 3.1 erscheinen. Durch Ausprobieren verschiedener Wertekombinationen für die Parameter finden wir heraus, daß β den geringsten Einfluß auf die Gestalt der Dispersionskurve hat. Dies hatte sich schon früher [3] gezeigt. In dem im folgenden beschriebenen systematischen Anpaßverfahren wird β deswegen von Hand auf bestimmte Werte festgelegt, während die anderen Parameter jeweils aus den experimentellen Daten bestimmt werden.
Um die übrigen vier Parameter J, λ, α und μ an die experimentellen Daten anzupassen, genügt es, vier besonders vertrauenswürdige Meßpunkte herauszugreifen und mit unseren Ergebnissen für die jeweiligen Wellenvektoren gleichzusetzen. Um mit denselben Einheiten zu arbeiten wie Regnault, stellen wir unsere Wellenzahlen in reziproken Gittereinheiten (r.G.) dar

$$\begin{aligned} k_b &\rightarrow 2\pi(1-k_b) \\ k_c &\rightarrow 2\pi(\frac{1}{2}-k_c)\ . \end{aligned} \tag{3.15}$$

Wellenvektor $\mathbf{k} = (k_b, k_c)$	$\omega(\mathbf{k})$/meV
$(0,0)$	2.3
$(0,\frac{1}{4})$	15.7
$(1,0)$	6.0
$(0,\frac{1}{20})$	4.55

Tabelle 3.2: Die vier experimentell bestimmten Dispersionspunkte für $CuGeO_3$, mit deren Hilfe die Parameter J, λ, α und μ bestimmt werden. Für die Werte von k_b und k_c beachte man Substitution (3.15).

Die vier resultierenden linearen Gleichungen können durch ein Computeralgebraprogramm wie MAPLE nach den gesuchten Größen aufgelöst werden. Natürlich geben die Meßfehler der einzelnen Punkte einen gewissen Spielraum in der Auswahl der in den Gleichungen zu verwendenden Werte. Ebenso könnte man andere Stützstellen verwenden. Weiter unten werden wir jedoch an einem Beispiel zeigen, daß die jeweils erhaltenen Parameterwerte recht stabil auf solche Modifikationen reagieren.
Nach dem oben beschriebenen Verfahren berechnen wir Werte für die Parameter J, λ, α und μ für die vorher festgelegten Werte $\beta = -0.3$, $\beta = 0$ und $\beta = 0.3$. Um eine systematische Abschätzung zu erhalten, werden die Werte für unterschiedliche Ordnungen der Störungsreihe bestimmt. Konkret wird die Bestimmung zunächst mit dem kompletten von uns berechneten Ausdruck durchgeführt (zehnte Ordnung in λ). Dann werden alle Terme $\propto \lambda^{10}$ weggelassen und die Bestimmung wird erneut durchgeführt (neunte Ordnung). Dann werden alle Terme $\propto \lambda^9$ weggelassen und so weiter. Auf diese Weise erhalten wir die in den Abbn. 3.6–3.8 dargestellten Analysen, die zeigen, wie sich die verschiedenen Parameter mit zunehmender Ordnung l der Störungsrechnung verändern. Gezeigt wird die Entwicklung der Parameter für voreingestelltes $\beta = 0.3$. Die Anpassung der Parameter erfolgt durch die experimentell bestimmten Punkte in Tabelle 3.2.
Man bekommt ähnliche Abbildungen für die beiden anderen β-Voreinstellungen $\beta = 0$ und $\beta = -0.3$.
Die Konvergenz unserer Störungsreihe voraussetzend extrapolieren wir die sich andeutenden Kurven für die Parameter als Funktion der Störungsordnung l zu höheren Ordnungen hin. Da wir ein lückenbehaftetes Spinmodell betrachten, wählen wir eine exponentielle Extrapolation

$$f(l) = X - be^{-2cl} \ . \tag{3.16}$$

Dabei ist X der asymptotische Wert des Parameters, l ist die Ordnung der

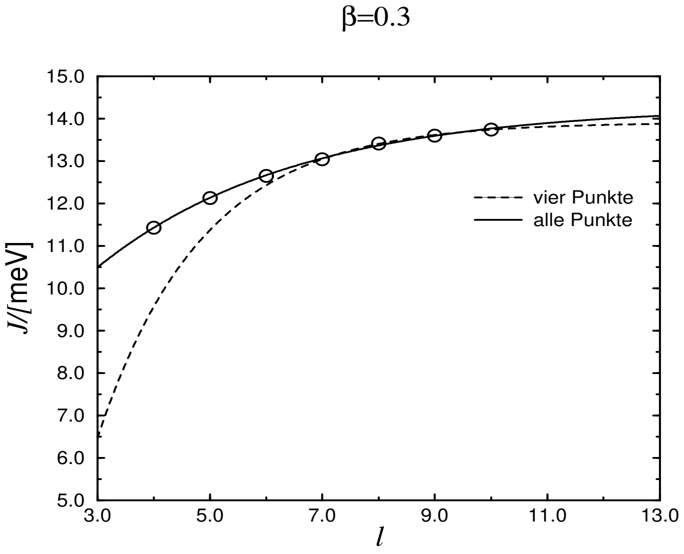

Abbildung 3.6: Gezeigt werden die durch unser Anpassungsverfahren gewonnenen Werte des Parameters J für verschiedene Ordnungen l der Störungsreihe bei voreingestelltem $\beta = 0.3$. Die eingezeichneten Kurven sind Extrapolationen der Punkte nach Gl. (3.16). Für die durchgezogene Linie werden alle eingezeichneten Punkte verwendet. Die gestrichelte Kurve ermitteln wir aus den letzten vier Punkten. Die Differenz der aus beiden Kurven bestimmten asymptotischen Werte für den Parameter wird als ein Maß für die Unsicherheit der Extrapolation angesehen.

Störungsreihe, und b und c sind Konstanten.
Zur Motivation sei folgendes festgestellt. In der Ordnung l unserer Störungsrechnung sind maximal l Dimer-Dimer Hüpfprozesse möglich. Die Zahl $2l$ kann hier also als Länge des maximal berücksichtigten Clusters (in den Einheiten des Abstands zwischen zwei Spins) interpretiert werden. Die Konstante c läßt sich dann als das Inverse einer Korrelationslänge ξ auffassen. Den experimentellen Daten in Tabelle 3.2 entnimmt man, daß das System (bei der im Experiment vorherrschenden Temperatur von 1.8K) eine Energielücke von $\Delta \approx 2.5$ meV aufweist. Auf Grund der Energielücke, fallen die magnetischen Korrelationen exponentiell ab ($\propto \exp(-l/\xi)$). In einer Dimension gilt für $\xi \approx v_S/\Delta$, wobei v_S die Spinwellengeschwindigkeit im lückenlosen System ist. Da wir es mit einem quasieindimensionalen System zu tun haben, nutzen wir diese Beziehung hier. Für die Spinwellengeschwindigkeit wissen wir $v_S = \pi/2 \cdot J(1 - 1.12\alpha)$ [51], so daß man bei $\alpha \approx 0.3$ auf $v_S \approx J$ kommt. Mit den bisher üblichen Werten für J (siehe Anfang dieses Kapitels) darf man also für die Konstante c einen Wert in der Größenordnung von $1/6$ erwarten.

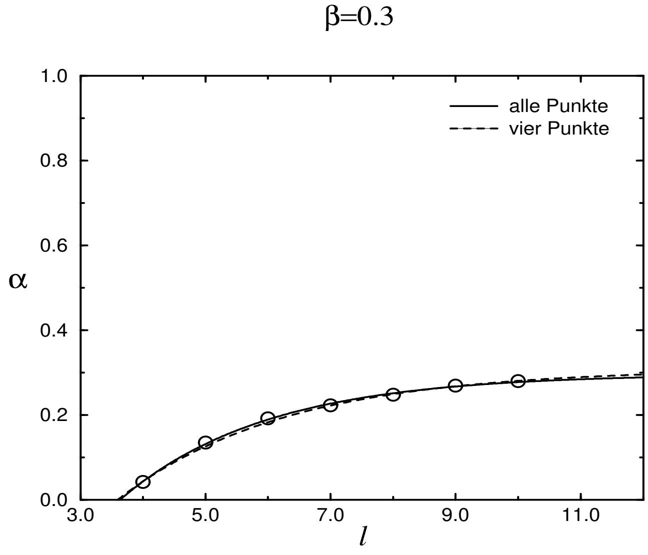

Abbildung 3.7: Werte des Parameters α bestimmt bei voreingestelltem $\beta = 0.3$ und verschiedenen Ordnungen der Störungsreihe. Die eingezeichneten Kurven sind Extrapolationen nach Gl. (3.16).

In den Abbn. 3.6–3.8 sind die Ergebnisse der Extrapolation gemäß Gl. (3.16) eingezeichnet. Um ein Maß für die Güte der jeweils gegebenen Punkte zu bekommen, wurden einmal alle berechneten Punkte in der Extrapolation berücksichtigt („alle Punkte“), ein anderes Mal nur die letzten vier Punkte („vier Punkte“). Man erkennt, daß die Extrapolationskurven „alle Punkte“ sehr gut die von uns bestimmten Punkte beschreiben. Aus Abb. 3.8 geht hervor, daß μ unter Veränderung der Ordnung l lediglich Oszillationen um einen Mittelwert ausführt, wobei diese im eingezeichneten Streifen bleiben. Dieses Verhalten findet man auch für $\beta = 0$ und $\beta = -0.3$. Die Tabelle 3.3 faßt die durch die Extrapolationen gewonnenen Ergebnisse zusammen. Man sieht, daß der Wert für c in der Tat jeweils in der Nähe von $1/6$ liegt, wie unsere Überlegung weiter oben erwarten ließ. Diese Tatsache sehen wir als Bestätigung der Wahl der Extrapolation (3.16) an.
Um konkrete Angaben machen zu können, bilden wir die Mittelwerte der asymptotischen Parameterwerte beider Extrapolationen. Der abgeschätzte Fehler ergibt sich aus der Differenz des Mittelwerts und einem der beiden Ausgangswerte. Für den Wert des Parameters μ nehmen wir die Mitte des in Abb. 3.8 eingezeichneten Streifens. Der Fehler wird als die Hälfte der Breite des Streifens angenommen. Tabelle 3.4 faßt die Resultate zusammen.
Oft bevorzugt man eine leicht modifizierte Wahl der Parameter, mit der man

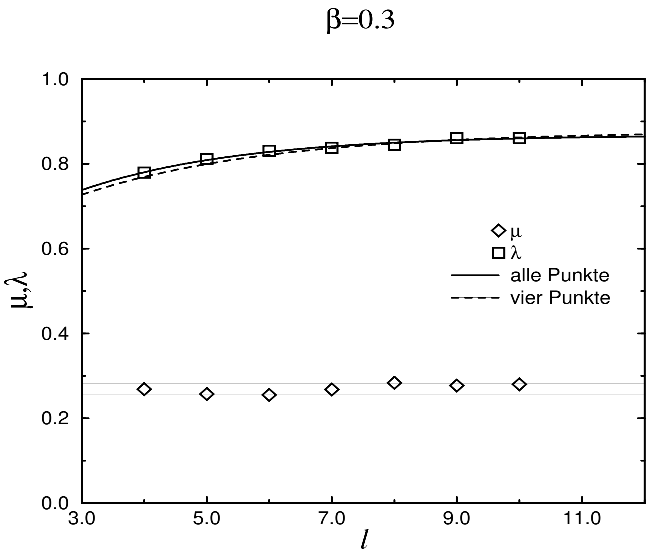

Abbildung 3.8: Werte der Parameter λ und μ bestimmt bei voreingestelltem $\beta = 0.3$ und verschiedenen Ordnungen der Störungsreihe. Die eingezeichneten Kurven durch die Punkte für λ sind Extrapolationen nach Gl. (3.16). Der Parameter μ oszilliert um einen Mittelwert. Die Oszillationen finden im eingezeichneten Streifen statt, weswegen seine Breite als ein Maß für die Ungenauigkeit in der μ-Bestimmung angesehen wird.

in Analogie zu Gl. (3.3) zu folgender schematischen Darstellung des Modellhamiltonians gelangt

$$\begin{aligned} H/J_0 &= (1+\delta)\sum \mathbf{S} \mathbf{-\!\!-} \mathbf{S} + (1-\delta)\sum \mathbf{S} - \mathbf{S} \\ &+ \alpha_0 \sum \mathbf{S} - \mathbf{S} + \mu_0 \sum \mathbf{S} \cdots \mathbf{S} + \mu_0\beta \sum \mathbf{S} \cdots \mathbf{S}\,. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Unser ursprüngliches Modell in Abb. 3.1 geht nach den Substitutionen

$$\begin{aligned} J &= J_0(1+\delta) \\ \lambda &= \frac{1-\delta}{1+\delta} \\ \alpha &= \frac{\alpha_0}{1-\delta} \\ \mu &= \frac{\mu_0}{1+\delta} \end{aligned} \tag{3.18}$$

in dieses über. Gemäß dieser Gleichungen berechnen wir die neuen Parameter aus den bisher bestimmten. Auch sie sind in Tabelle 3.4 angeben. Die

	Alle Punkte berücksichtigt			Vier Punkte berücksichtigt		
	X	b	c	X	b	c
$\beta = 0.3$						
α	0.297	1.41	0.215	0.309	1.18	0.187
λ	0.868	0.423	0.197	0.877	0.404	0.165
J/meV	14.29	8.88	0.142	13.91	37.4	0.269
$\beta = 0$						
α	0.308	1.34	0.191	0.323	1.30	0.173
λ	0.900	0.38	0.140	0.896	0.754	0.191
J/meV	13.64	8.0	0.133	13.67	9.3	0.139
$\beta = -0.3$						
α	0.314	1.28	0.180	0.326	1.37	0.173
λ	0.913	0.369	0.127	0.903	0.832	0.192
J/meV	13.56	7.69	0.127	13.57	9.12	0.136

Tabelle 3.3: Die durch Extrapolation gemäß Gl. (3.16) gewonnenen asymptotischen Werte der Parameter (X). Auch die beiden anderen Extrapolationskonstanten b und c sind angegeben. Die Bestimmung von X wurde einmal unter Berücksichtigung aller Punkte, ein anderes Mal unter Berücksichtigung nur der letzten vier Punkte jeweils für drei verschiedene Werte von β durchgeführt. Erwartungsgemäß liegt c jeweils in der Nähe von 1/6.

berechneten Mittelwerte der Parameter J, λ und α verhalten sich sehr stabil unter Variation von β. Der Parameter μ scheint stärker von β abzuhängen. Der Wert für δ liegt im erwarteten Intervall (vgl. Anfang dieses Abschnitts). Wie zu Beginn dieses Abschnitts erhofft, liegt die Dimerisierung tatsächlich in einem Bereich, in dem wir den Ergebnissen zehnter Ordnung unserer Methode quantitativ vertrauen können (siehe Abschnitt 2.4). Auch die anderen Parameter haben die erwarteten Größenordnungen.

Die Gestalt der sich aus den ermittelten Parameterwerten ergebenden Dispersionskurven ändert sich nur sehr wenig, wenn man von einem voreingestellten β zu einem anderen wechselt. Die Abbn. 3.9 und 3.10 zeigen die von uns berechnete Dispersion $\omega(\mathbf{k}) = \omega(k_a, k_b, k_c)$. Um darin auch die Dispersion in a-Richtung zu berücksichtigen, addieren wir den Term $4t_a \cos(k_a)\cos(k_c)$ zu der durch Gl. (3.13) gegebenen Dispersion $\omega(\mathbf{k})$, mit $4t_a = 0.22$ [9]. Dieser Term ist analog zum ersten Term in der zweiten Zeile der Gl. (3.13), da das Dimerisierungsmuster auch in a-Richtung alterniert [48]. Mit dieser kleinen Erweiterung versehen zeigt Abb. 3.9 die Dispersion $\omega(k_a = 0, k_b = 0, k_c)$ in c-Richtung und Abb. 3.10 die Dispersion $\omega(k_a = 0, k_b, k_c = 0)$ in b-Richtung. (Man beachte, daß auch k_a analog zu Gln. (3.15) modifiziert wurde.) Der

$\beta = 0.3$			
α	0.303±0.006	α_0	0.28±0.01
λ	0.873±0.005	δ	0.068±0.003
μ	0.27±0.01	μ_0	0.29±0.01
J/meV	14.1±0.2	J_0	13.2±0.2
$\beta = 0$			
α	0.316±0.008	α_0	0.30±0.01
λ	0.898±0.002	δ	0.054±0.003
μ	0.13±0.01	μ_0	0.14±0.01
J/meV	13.7±0.1	J_0	13.0±0.1
$\beta = -0.3$			
α	0.320±0.006	α_0	0.30±0.01
λ	0.908±0.005	δ	0.048±0.003
μ	0.09±0.01	μ_0	0.09±0.01
J/meV	13.6±0.1	J_0	13.0±0.1

Tabelle 3.4: Zusammenfassung der aus Tabelle 3.3 ersichtlichen Werte für die Parameter, die man voraussichtlich erhält, wenn man die Störungsreihe unendlich weit fortsetzen könnte. Die Fehlerabschätzungen ergeben sich aus der Mittelung der in Tabelle 3.3 angegebenen Werte und stellen ein Maß für die Unsicherheit unseres störungstheoretischen Zugangs und dessen Extrapolation dar.

Einfluß von β ist schwach. Die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ist in beiden Fällen exzellent. Für größere Werte von k_c erkennt man in Abb. 3.9 kleinere Abweichungen von den experimentellen Daten. Es wäre hier besonders wünschenswert, über weitere Daten zu verfügen. Die in Tabelle 3.2 aufgeführten experimentellen Daten, aus denen wir die Parameterwerte bestimmt haben, sind in den Abbildungen durch Pfeile gekennzeichnet. Die ausgefüllten Symbole in Abb. 3.9 entsprechen experimentellen Punkten, die mit einem weitaus kleineren Meßfehler bestimmt werden konnten, weswegen wir hier auf die Angabe der Fehlerbalken verzichten. Die eingezeichneten Kurven stammen aus Berechnungen mit allen zur Verfügung stehenden Termen ($l = 10$ vgl. weiter oben). Die so bestimmten Parameterwerte sind im Text der Abb. 3.9 angegeben.
Wir wollen nun überprüfen, welchen Einfluß die Verwendung anderer experimenteller Punkte bei der Bestimmung der Parameter auf diese und auf die Gestalt der Dispersionskurve hat. Die Abb. 3.11 zeigt die Dispersion in c-Richtung für den Fall, daß man in den Berechnungen den Punkt $(1/20, 4.55$ meV$)$ in Tabelle 3.2 gegen den Punkt $(1/10, 8.5$ meV$)$ austauscht. Dabei wurde

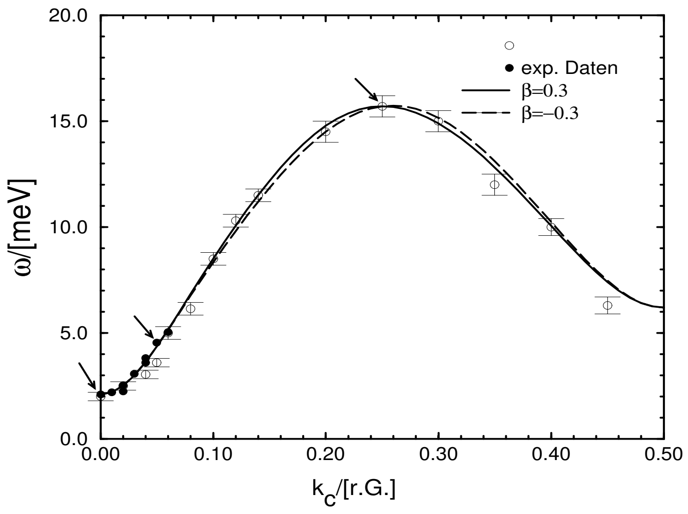

Abbildung 3.9: Dispersion $\omega(k_a = 0, k_b = 0, k_c)$ in c-Richtung. Unter Verwendung der durch die Pfeile gekennzeichneten experimentellen Punkte bestimmte sich der Parametersatz (J, λ, α, μ) für voreingestelltes $\beta = 0.3$ zu (13.74 meV, 0.860, 0.280, 0.280) und für $\beta = -0.3$ zu (12.96 meV, 0.883, 0.281, 0.092). Dabei wurden alle zur Verfügung stehenden Terme der Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ verwendet.

$\beta = 0.3$ voreingestellt. Die gestrichelte Linie „Punkt: (0.1, 8.2)" ist das Ergebnis für den Fall, daß man den Punkt $(1/10, 8.2 \text{ meV})$ in der Rechnung berücksichtigt, der entsteht, wenn man vom Dispersionswert den ganzen Meßfehler von 0.3 meV abzieht [4]. Analog ist „Punkt: (0.1, 8.8)" das Ergebnis, wenn man den vollen Meßfehler hinzuaddiert. Man erkennt, daß sich die Gestalt der Kurve nur geringfügig ändert. In Abb. 3.12 wird eine Ausschnittsvergrößerung für den Bereich kleiner Wellenzahlen k_c gezeigt. Hier liegen Meßdaten mit einer hohen Genauigkeit vor (ausgefüllte Kreise). Die gestrichelte Kurve startet in diesem Bereich etwas zu flach, während die durchgezogene einen nahezu optimalen Verlauf nimmt. Allerdings scheint letztere für etwas größere Wellenzahlen dann doch etwas zu steil zu sein (siehe Punkt (0.8, 6.2 meV) in Abb. 3.12). Zum Vergleich wird in Abb. 3.12 nocheinmal die Kurve aus Abb. 3.9 für $\beta = 0.3$ und Stützpunkt (0.05, 4.55 meV) dargestellt. Wir fassen die den drei Kurven entsprechenden Parametersätze in Tabelle 3.5 zusammen. Die Werte liegen nach wie vor in (oder zumindest nahe an) den zuvor bestimmten Intervallen aus Tabelle 3.4. Allerdings weicht die Kurve, die unter Verwendung des Stützpunktes (0.1, 8.2 meV) berechnet wurde, stärker von den hochgenau gemessenen Daten in Abb. 3.12 ab. Wir sind deshalb weniger ge-

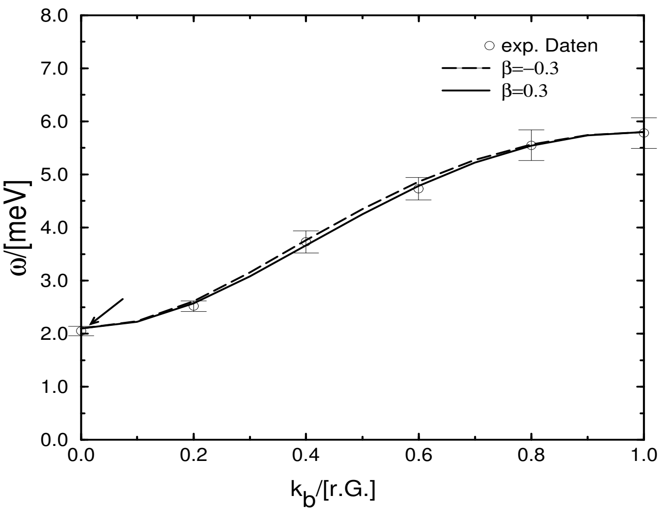

Abbildung 3.10: Dispersion $\omega(k_a = 0, k_b, k_c = 0)$ in b-Richtung. Weitere Erläuterungen siehe Abb. 3.9.

$\beta = 0.3$				
Stützpunkt	J	λ	α	μ
(0.05, 4.55 meV)	13.74 meV	0.860	0.280	0.280
(0.1, 8.8 meV)	13.60 meV	0.855	0.269	0.276
(0.1, 8.2 meV)	14.43 meV	0.884	0.329	0.303

Tabelle 3.5: Die Parametersätze der drei in der Abb. 3.12 dargestellten Kurven. Die Parameterwerte, die sich aus der Verwendung des Stützpunktes (0.1, 8.2 meV) ergeben, weichen etwas von den beiden anderen Parametersätzen ab. Die zugehörige Kurve zeigt in Abb. 3.12 ein entsprechend anderes Verhalten im Bereich kleiner Wellenzahlen.

neigt, dem entsprechendem Parametersatz zu vertrauen. Allerdings macht er die durch die Meßfehler hervorgerufene Unsicherheit in unserem Anpassungsverfahren deutlich. Entsprechende Abbildungen für die b-Richtung zu zeigen, bringt keine neuen Erkenntnisse. Die verschiedenen Kurven lassen sich nur bei extremer Vergrößerung optisch voneinander trennen.
Wir wiederholen diese Vorgehensweise für verschiedene Punkte. In manchen Fällen führt das volle Ausnutzen der Fehlergrenzen zu Kurven, deren Verlauf sich deutlich schlechter mit dem der experimentellen Daten deckt, als dies in den hier gezeigten Abbildungen der Fall ist. Vor allem bei Variationen von Meßdaten sehr kleiner Wellenzahlen k_c kann dieser Effekt beobachtet werden.

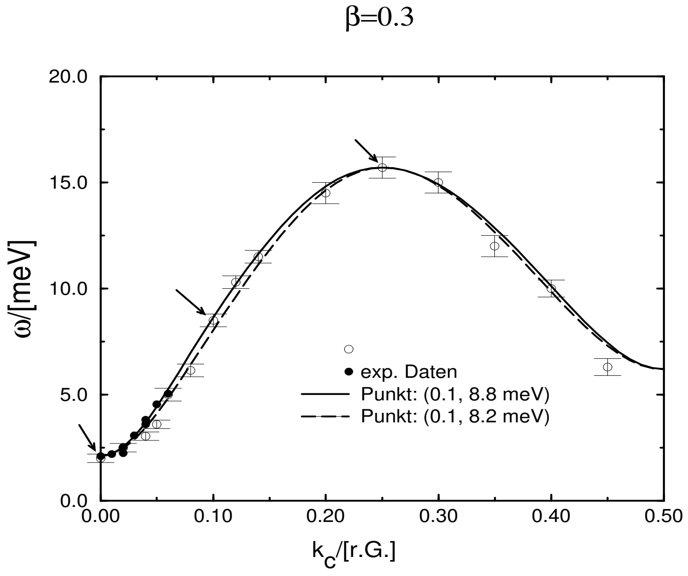

Abbildung 3.11: Dispersion $\omega(k_a = 0, k_b = 0, k_c)$ in c-Richtung unter Verwendung des experimentellen Punktes (0.1, 8.5 meV). Falls man die untere Fehlergrenze dieses Punktes als *wahren* Meßpunkt annimmt, erhält man die Kurve „Punkt: (0.1, 8.2 meV)“, für die obere Grenze erhält man „Punkt: (0.1, 8.8 meV)“. Beide Berechnungen wurden mit voreingestelltem $\beta = 0.3$ durchgeführt. Die sich jeweils ergebenden Parametersätze sind in Tabelle 3.5 aufgeführt. In der Berechnung wurden alle zur Verfügung stehenden Terme der Dispersion $\omega(\mathbf{k})$ berücksichtigt. Die in Abb. 3.9 dargestellte Kurve für $\beta = 0.3$ und Stützpunkt $(0.05, 4.55\,\mathrm{meV})$ liegt sehr dicht an der hier gezeigten Kurve „Punkt: (0.1, 8.8 meV)“. In der Ausschnittsvergrößerung Abb. 3.12 erkennt man die geringe Abweichung (punkt-gestrichelte Linie). Zum Vergleich findet man auch ihre Parameterwerte in der Tabelle 3.5.

Diese Anpassungen werden verworfen.
Wie Abb. 3.10 bereits erkennen läßt, zeigt sich, daß die Dispersionskurven in b-Richtung für positive Werte von β im allgemeinen einen die experimentellen Daten besser abdeckenden Verlauf annehmen.
Tabelle 3.6 gibt zusammenfassend das Resultat unserer Anpassungen an. Dabei versuchen wir auch den β-Wert einzugrenzen. Das Durchprobieren verschiedener Meßpunkte unter Berücksichtigung ihrer jeweiligen Fehler zur Bestimmung der Parameter führt zur Erhöhung der Breite der Parameterintervalle. Man beachte, daß diese zusätzlich berücksichtigte Unsicherheit in der Bestimmung der Parameter eine direkte Folge der Meßfehler ist, und nicht in der theoretischen Analyse begründet ist. Um die Genauigkeit aller Parameter im Rahmen unseres Verfahrens erhöhen zu können, werden weitere Meßdaten, mit kleineren Meßfehlern, benötigt. Die in Tabelle 3.6 angegebenen Intervalle dürfen also (was unsere Methode betrifft) als recht konservative Abschätzungen

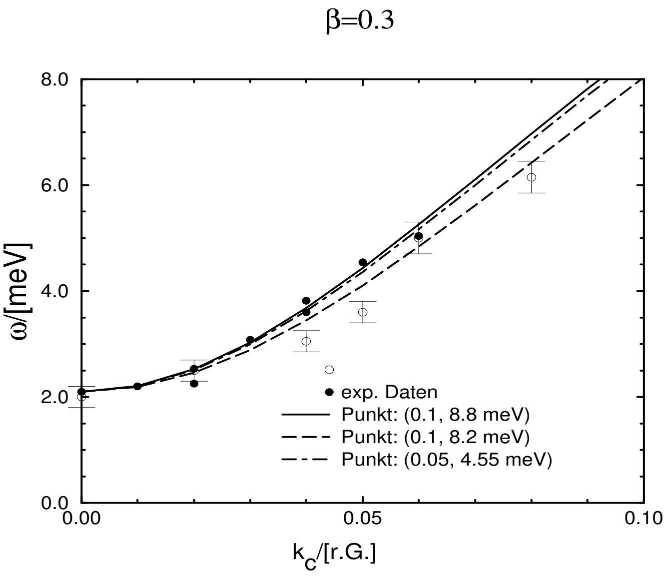

Abbildung 3.12: Ausschnittsvergrößerung aus Abb. 3.11. Gezeigt wird der Bereich kleiner Wellenzahlen k_c, in dem sehr genaue Messungen durchgeführt worden sind (ausgefüllte Punkte). Gerade hier ist es wichtig zu sehen, wie die berechneten Kurven verlaufen. Die punkt-gestrichelte Linie ist noch einmal die Kurve für $\beta = 0.3$ und Stützpunkt (0.05, 4.55 meV) aus Abb. 3.9.

Parameter	Werteintervall	Parameter	Werteintervall
α	[0.27, 0.33]	α_0	[0.25, 0.31]
λ	[0.86, 0.91]	δ	[0.05, 0.08]
μ	[0.05, 0.30]	μ_0	[0.05, 0.30]
J	[13.5, 14.5]	J_0	[12.7, 13.5]
β	[0.0, 0.4]	β	[0.0, 0.4]

Tabelle 3.6: Durch Anpassung an Meßdaten zur magnetischen Dispersion in $CuGeO_3$ bestimmte Intervalle für die Parameter des Modells in Abb. 3.1. Meßungenauigkeiten wurden hier genauso berücksichtigt wie die Unsicherheiten unseres störungstheoretischen Ansatzes. In dieser Darstellung der Parameterintervalle nehmen wir auch β als unbekannt an.

bezeichnet werden und könnten im wesentlichen nur durch eine Verbesserung der experimentellen Auflösung weiter eingeengt werden.
Fassen wir die wesentlichen Ergebnisse zusammen. Das von uns gefundene Werteintervall für die Dimerisierung δ ist in sehr guter Übereinstimmung mit experimentell bestimmten Werten. So konnten Büchner *et al.* [52] vor kurzem durch Untersuchung der Druckabhängigkeit der Kopplungskonstanten in

$CuGeO_3$ eine untere Schranke von 3% für die Dimerisierung bestimmen, was sich sehr gut mit unserem Resultat verträgt.
Was die Frustration α angeht, so erhalten wir geringere Werte als beispielsweise Fabricius *et al.* [45]. Durch Anpassung eines eindimensionalen frustrierten Spinmodells an experimentelle Daten zur temperaturabhängigen magnetischen Suszeptibilität in $CuGeO_3$ erhalten sie einen Wert von $\alpha = 0.354$, mit dem sie die experimentellen Daten hervorragend reproduzieren können. Die Abweichung unseres Parameterintervalls von der bisher angenommenen Größenordnung der Frustration mag in der bislang üblichen Verwendung von eindimensionalen Modellen begründet sein. Die Berücksichtigung von Phononen kann ebenfalls einen Einfluß auf die Größe der Modellparameter haben. In diesem Zusammenhang kann unser Modell als ein effektives Spinmodell angesehen werden. Entsprechend sind unsere Parameter als effektive Parameter aufzufassen, deren Werte sich durch Phononenberücksichtigung ändern mögen.
Eine weitere Einengung der Parameterintervalle für μ und β durch unsere Methode muß solange aufgeschoben werden, bis weitere Meßdaten zur Verfügung stehen.

Kapitel 4

Fazit und Ausblick

Aufbauend auf einer geeignet gewählten kontinuierlichen unitären Transformation [1] stellen wir einen neuartigen störungstheoretischen Zugang dar. Das Verfahren läßt sich anwenden, wenn der ungestörte Teil des Hamiltonoperators ein von unten beschränktes äquidistantes Spektrum aufweist, das durch die Anzahl der im System befindlichen Energiequanten klassifiziert werden kann. Der Störoperator darf die Anzahl der Energiequanten maximal um eine endliche Zahl N verändern. Damit haben wir das von Stein ($N = 1$) [2] vorgeschlagene Verfahren auf den Fall beliebiger (endlicher) N erweitert. Die unitäre Transformation wird durch die Anwendung von Flußgleichungen realisiert.
Durch die Transformation wird eine systematische Abbildung des ursprünglichen Problems auf einen effektiven Hamiltonoperator erreicht, welcher die Anzahl der Energiequanten im System erhält. Dadurch werden Hilbertraumsektoren mit verschiedenen Anzahlen von Energiequanten voneinander getrennt. Unser Verfahren wird besonders in solchen Problemen von Nutzen sein, in denen eine Standardstörungstheorie durch nicht bekannte oder nur schwer zu berechnende Störzustände erschwert wird. Solche Situationen liegen beispielsweise in Systemen ohne Translationsinvarianz oder in Zwei-Teilchen-Problemen vor. Die Möglichkeit, Ergebnisse in symbolischer Form zu erhalten, unterscheidet unseren Zugang zu der Multipräzisionsmethode von Barnes *et al.* [17] und anderen konventionellen Implementierungen [18], sowie numerischen Methoden wie exakte Diagonalisierung oder Quanten-Monte-Carlo.
Die Umsetzung des perturbativen Verfahrens teilt sich in zwei voneinander getrennte Schritte auf, wobei der erste allgemein formuliert werden kann, und der zweite von modellspezifischer Natur ist. Die im ersten Schritt resultierenden Koeffizienten berechneten wir für $N = 2$ bis einschließlich zehnter Ordnung. In schriftlicher Form findet man sie bis einschließlich sechster Ordnung in Anhang A. Die restlichen Koeffizienten werden auf elektronischem Weg zur Verfügung

gestellt.
Der zweite Schritt wurde an zwei Spinmodellen illustriert. Zunächst haben wir die antiferromagnetische dimerisierte und frustrierte $S = 1/2$ Kette behandelt. In einer zweiten Anwendung haben wir uns mit einem zweidimensionalen Spinmodell für $CuGeO_3$ [3] beschäftigt. In beiden Fällen hat der ungestörte Hamiltonoperator im Limes isolierter Dimere ein äquidistantes Spektrum. Der Grundzustand ist jeweils gegeben durch den Produktzustand von Singuletts auf den Dimeren. Die Energiequanten sind Tripletts auf den Dimeren. Die als schwache Störung angenommenen Kopplungen zwischen den Dimeren können in beiden Modellen jeweils maximal zwei Tripletts erzeugen bzw. vernichten, so daß die Bedingung $N = 2$ erfüllt ist. Nach der Transformation wird die Anzahl der Tripletts erhalten.
Für die $S = 1/2$ Kette zeigen wir Ergebnisse für die Grundzustandsenergie (keine Tripletts), die Energielücke und die Ein-Magnon-Dispersion (ein Triplett) in Form von Polynomen in den Modellparametern λ und α. Diese können von jedem benutzt werden, der z.B. Anpassungen des Modells an bestimmte experimentelle Daten vornehmen möchte. Es sind keine weiteren Rechnungen notwendig. Die Anpassungen können in kürzester Zeit ausgeführt werden. Ferner ist mit den Ergebnissen für den Dimerisierungsoperator H_{DIM} die Abhängigkeit der Dimerisierung δ von der elastischen Federkonstante K schnell zugänglich, wie sie in adiabatischen Spin-Peierls-Modellen wichtig ist. Wir konnten zeigen, daß die gewonnenen Ergebnisse bis hinunter zu einer Dimerisierung von etwa 6% zuverlässig sind. Durch das Einfügen zusätzlicher Informationen (wie z.B. kritische Exponenten oder ähnliches) kann der Bereich, in dem unsere Resultate verläßlich verwendet werden können, bis hinunter zu 2% ausgebaut werden.
Für das zweidimensionale Spinmodell bestimmten wir die Ein-Magnon-Dispersion als Ausdruck in den entsprechenden Modellparametern. Das Resultat wurde benutzt, um die Parameter an experimentelle Daten zur magnetischen Dispersion in $CuGeO_3$ [4] anzupassen. Abschließend konnten wir Intervalle für die Modellparameter angeben, deren Breite zu einem großen Teil von den Ungenauigkeiten der Messung bestimmt wird.
Wie wir in der Ergebnisdiskussion für die $S = 1/2$ Kette andeuteten, dürfte es eine interessante Aufgabe sein, die Methode der *partial differential approximants* [29] auf unsere parameterabhängigen Resultate anzuwenden. Für beide Modelle rücken damit Untersuchungen multisingulärer Punkte, wie etwa $(\delta = 0, \alpha = \alpha_c)$ für die Kette, in greifbare Nähe.
Verzichtet man auf *symbolische* Ergebnisse, so könnten die Entwicklungen der verschiedenen physikalischen Größen um bis zu zwei Ordnungen weitergetrieben werden. Zu diesem Zweck müßte man bestimmte Parametervoreinstel-

lungen in den entsprechenden Programmteilen vornehmen. Außerdem würde in der Bestimmung der $C(\underline{m})$ Koeffizienten ein Ausnutzen der hergeleiteten Symmetrierelationen zu einer Erhöhung der berechenbaren Ordnung führen, denn dadurch könnte mindestens ein Viertel des bislang benötigten Speichers eingespart werden.

Natürlich gibt es eine ganze Liste von Modellen, die durch unsere Methode angegangen werden könnten. Besonders interessant wären hier Systeme, die der Bedingung $N = 1$ unterliegen. Dafür in Frage kommen z.B. Spinleitern, in denen jeweils nur ein Triplett erzeugt, vernichtet oder verschoben werden kann. Hier könnten wir Berechnungen in fünfzehnter Ordnung oder höher durchführen.

Eine weitere faszinierende Anwendung unserer Methode wären Berechnungen auf dem Gebiet des Zwei-Magnon-Problems. Die anziehende Wechselwirkung zwischen zwei Magnonen beispielsweise [13] führt zu gebundenen Zuständen. Für $(VO)_2P_2O_7$, das durch eine relativ starke Dimerisierung gekennzeichnet ist, wurden solche Untersuchungen bereits durch Berechnungen in vierter Ordnung durchgeführt [53].

Durch Anwendung der Flußgleichungen können auch Spektralfunktionen untersucht werden, wenn die entsprechende Observable Q derselben unitären Transformation unterzogen wird wie der Hamiltonoperator

$$\frac{dQ(l)}{dl} = [\eta(l), Q(l)] \ . \tag{4.1}$$

Auf diese Weise erhält man die Matrixelemente von Q nach der Transformation. Vorläufige Untersuchungen zeigen, daß Gl. (4.1) durch den vorgestellten störungstheoretischen Zugang angegangen werden kann. Allerdings ist die Behandlung von Observablen aufwendiger als die entsprechenden Berechnungen zum Hamiltonoperator selbst.

Anhang A

Koeffizienten

In der folgenden Tabelle sind die Koeffizienten $C(\underline{m})$ des effektiven Hamiltonoperators (1.52) bis einschließlich sechster Ordnung angegeben. Um eine möglichst knappe Darstellung zu gewährleisten, wurden die Symmetrierelationen (1.60, 1.61) benutzt. Die Koeffizienten bis einschließlich zehnter Ordnung werden elektronisch zur Verfügung gestellt.

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 1$	
0	1
$\lvert\underline{m}\rvert = 2$	
1-1	1
2-2	1/2
$\lvert\underline{m}\rvert = 3$	
01-1	-1/2
02-2	-1/8
10-1	1
11-2	1/2
1-21	-1
20-2	1/4
$\lvert\underline{m}\rvert = 4$	
001-1	1/4
002-2	1/32
010-1	-1
011-2	-3/8
01-21	1/4
01-10	1/2
020-2	-1/8
02-20	1/16
02-1-1	-3/8
100-1	1
101-2	1/2
10-21	-1
110-2	1/4
11-1-1	1/2
12-2-1	1/3
12-1-2	1/6
1-22-1	-1
1-2-12	1/2
1-11-1	-1
1-12-2	-3/8
1-1-22	1/8
200-2	1/8
21-1-2	1/12
22-2-2	1/16
2-22-2	-1/8
2-11-2	1/4
$\lvert\underline{m}\rvert = 5$	
0001-1	-1/8
0002-2	-1/128
0010-1	3/4
0011-2	7/32
001-21	-5/16
001-10	-3/8
0020-2	3/64
002-20	-3/128
002-1-1	7/32
0100-1	-3/2
0101-2	-5/8

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 5$	
010-21	7/8
010-10	3/2
0110-2	-1/4
011-20	7/16
011-1-1	-5/8
012-2-1	-7/18
012-1-2	-11/72
01-201	1/8
01-210	-3/8
01-22-1	1/2
01-2-12	-1/24
01-11-1	9/8
01-12-2	35/96
01-1-22	-19/96
01-1-11	-3/8
0200-2	-3/32
020-20	3/32
020-1-1	-1/4
021-2-1	-11/72
021-1-2	-1/18
022-2-2	-5/128
02-21-1	7/24
02-22-2	9/128
02-2-22	-3/128
02-2-11	-1/12
02-10-1	-5/8
02-11-2	-1/4
02-1-21	7/24
1000-1	1
1001-2	1/2
100-21	-1
1010-2	1/4
101-1-1	1/2
102-2-1	1/3
102-1-2	1/6
10-201	1
10-22-1	-1
10-2-12	1/2
10-11-1	-3/2
10-12-2	-5/8
10-1-22	3/8
10-1-11	1/2
1100-2	1/8
110-1-1	1/4
111-2-1	1/6
111-1-2	1/12
112-2-2	1/16
11-21-1	-5/8
11-22-2	-1/4
11-2-22	1/8

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 5$	
11-2-11	1/8
11-11-2	1/4
11-1-21	-1/2
120-2-1	1/9
120-1-2	1/18
121-2-2	1/24
12-21-2	1/6
12-2-21	-1/3
12-10-2	1/12
1-202-1	1
1-20-12	-1/2
1-211-1	1/4
1-212-2	0
1-21-22	1/4
1-21-11	3/4
1-221-2	-1/2
1-22-21	1
1-2-212	-1/6
1-2-102	-1/4
1-101-1	3/4
1-102-2	7/32
1-10-22	-3/32
1-10-11	-1/4
1-111-2	-5/8
1-120-2	-1/4
1-1-202	0
1-1-1-12	1/8
2000-2	1/16
201-1-2	1/24
202-2-2	1/32
20-22-2	-3/32
20-2-22	1/32
20-11-2	1/8
210-1-2	1/36
211-2-2	1/48
21-21-2	1/12
220-2-2	1/64
2-202-2	3/64
2-20-22	-1/64
2-211-2	-1/4
2-2-1-12	1/8
2-101-2	1/4
2-1-2-12	1/4
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
00001-1	1/16
00002-2	1/512
00010-1	-1/2
00011-2	-15/128
0001-21	5/64
0001-10	1/4

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
00020-2	-1/64
0002-20	1/128
0002-1-1	-15/128
00100-1	3/2
00101-2	17/32
0010-21	-3/4
0010-10	-3/2
00110-2	11/64
0011-20	-45/128
0011-1-1	17/32
0012-2-1	17/54
0012-1-2	85/864
001-201	1/2
001-210	1/64
001-22-1	-13/24
001-2-12	53/288
001-100	3/8
001-11-1	-29/32
001-12-2	-301/1152
001-1-22	179/1152
001-1-11	7/32
00200-2	3/64
0020-20	-3/64
0020-1-1	11/64
0021-2-1	85/864
0021-1-2	43/1728
0022-2-2	17/1024
002-200	3/256
002-21-1	-197/1152
002-22-2	-29/1024
002-2-22	7/1024
002-2-11	-23/1152
002-10-1	17/32
002-11-2	11/64
002-1-21	-65/288
002-1-10	-45/128
01000-1	-2
01001-2	-7/8
0100-21	23/16
0100-10	3
01010-2	-3/8
0101-20	17/16
0101-1-1	-7/8
0102-2-1	-5/9
0102-1-2	-17/72
010-201	-5/8
010-210	-3/4
010-22-1	9/8
010-2-12	-7/18
010-11-1	39/16

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
010-12-2	269/288
010-1-22	-181/288
010-1-11	-17/16
01100-2	-5/32
0110-20	11/32
0110-1-1	-3/8
0111-2-1	-17/72
0111-1-2	-7/72
0112-2-2	-9/128
011-21-1	5/6
011-22-2	113/384
011-2-22	-67/384
011-2-11	-7/24
011-10-1	-7/8
011-11-2	-3/8
011-1-21	7/12
011-1-10	17/16
0120-2-1	-4/27
0120-1-2	-13/216
0121-2-2	-25/576
012-20-1	-5/9
012-21-2	-17/72
012-2-21	103/288
012-2-10	17/27
012-10-2	-7/72
012-1-20	85/432
012-1-1-1	-17/72
01-2001	-9/16
01-202-1	0
01-20-12	-1/6
01-211-1	-2/3
01-212-2	-15/64
01-21-22	37/192
01-21-11	13/24
01-220-1	7/8
01-221-2	1/3
01-22-21	-5/16
01-22-10	-11/12
01-2-212	-1/144
01-2-221	-25/288
01-2-102	-1/36
01-2-111	-1/6
01-2-120	31/144
01-101-1	-1
01-102-2	-329/1152
01-10-22	53/384
01-10-11	3/16
01-110-1	33/16
01-111-2	73/96
01-11-21	-49/48

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
01-11-10	-27/16
01-120-2	151/576
01-12-20	-149/384
01-12-1-1	73/96
01-1-202	47/576
01-1-211	17/96
01-1-220	113/1152
01-1-101	7/16
01-1-12-1	-31/48
01-1-1-12	17/96
02000-2	-1/16
0200-20	3/32
0200-1-1	-5/32
0201-2-1	-7/72
0201-1-2	-11/288
0202-2-2	-7/256
020-21-1	73/288
020-22-2	39/512
020-2-22	-17/512
020-2-11	-17/288
020-10-1	-3/8
020-11-2	-5/32
020-1-21	2/9
0210-2-1	-13/216
0210-1-2	-5/216
0211-2-2	-19/1152
021-20-1	-17/72
021-21-2	-7/72
021-2-21	19/144
021-10-2	-11/288
021-1-20	43/864
021-1-1-1	-7/72
0220-2-2	-3/256
022-20-2	-7/256
022-2-20	17/512
022-2-1-1	-9/128
022-1-2-1	-25/576
022-1-1-2	-19/1152
02-201-1	-211/1152
02-202-2	-1/32
02-20-22	3/512
02-20-11	-7/384
02-210-1	95/144
02-211-2	85/384
02-21-21	-53/192
02-220-2	33/512
02-22-20	-27/512
02-22-1-1	85/384
02-2-202	7/512
02-2-211	23/384

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
02-2-101	31/144
02-2-12-1	-11/64
02-2-1-12	23/384
02-100-1	-7/8
02-101-2	-3/8
02-10-21	7/12
02-110-2	-5/32
02-11-20	11/32
02-11-1-1	-3/8
02-12-2-1	-17/72
02-12-1-2	-7/72
02-1-201	-5/36
02-1-22-1	5/12
02-1-2-12	-11/96
02-1-11-1	5/6
02-1-12-2	113/384
02-1-1-22	-67/384
02-1-1-11	-7/24
10000-1	1
10001-2	1/2
1000-21	-1
10010-2	1/4
1001-1-1	1/2
1002-2-1	1/3
1002-1-2	1/6
100-201	1
100-22-1	-1
100-2-12	1/2
100-11-1	-2
100-12-2	-7/8
100-1-22	5/8
100-1-11	1
10100-2	1/8
1010-1-1	1/4
1011-2-1	1/6
1011-1-2	1/12
1012-2-2	1/16
101-21-1	-7/8
101-22-2	-3/8
101-2-22	1/4
101-2-11	3/8
101-10-1	1/2
101-11-2	1/4
101-1-21	-1/2
1020-2-1	1/9
1020-1-2	1/18
1021-2-2	1/24
102-20-1	1/3
102-21-2	1/6
102-2-21	-1/3
102-10-2	1/12
102-1-1-1	1/6
10-202-1	1
10-20-12	-1/2
10-211-1	5/8

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
10-212-2	3/16
10-21-22	1/16
10-21-11	3/8
10-220-1	-1
10-221-2	-1/2
10-22-21	1
10-2-212	-1/6
10-2-221	-1/3
10-2-102	-1/4
10-2-111	-1/2
10-101-1	3/2
10-102-2	17/32
10-10-22	-9/32
10-10-11	-1/2
10-110-1	-2
10-111-2	-7/8
10-11-21	5/4
10-120-2	-3/8
10-12-1-1	-7/8
10-1-202	-1/8
10-1-211	-1/8
10-1-12-1	3/4
10-1-1-12	-1/8
11000-2	1/16
1100-1-1	1/8
1101-2-1	1/12
1101-1-2	1/24
1102-2-2	1/32
110-21-1	-3/8
110-22-2	-5/32
110-2-22	3/32
110-2-11	1/8
110-11-2	1/8
110-1-21	-1/4
1110-2-1	1/18
1110-1-2	1/36
1111-2-2	1/48
111-21-2	1/12
111-2-21	-1/6
111-10-2	1/24
111-1-1-1	1/12
1120-2-2	1/64
112-20-2	1/32
112-2-1-1	1/16
112-1-2-1	1/24
112-1-1-2	1/48
11-201-1	17/32
11-202-2	11/64
11-20-22	-5/64
11-20-11	-5/32
11-211-2	-3/8
11-21-21	1/2
11-220-2	-5/32
11-22-1-1	-3/8
11-2-202	-1/32

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
11-2-12-1	1/4
11-101-2	1/4
11-10-21	-1/2
11-110-2	1/8
11-11-1-1	1/4
11-12-2-1	1/6
11-12-1-2	1/12
11-1-22-1	-1/2
11-1-2-12	1/4
11-1-11-1	-7/8
11-1-12-2	-3/8
11-1-1-22	1/4
11-1-1-11	3/8
1200-2-1	1/27
1200-1-2	1/54
1201-2-2	1/72
120-21-2	1/18
120-2-21	-1/9
120-10-2	1/36
1210-2-2	1/96
121-20-2	1/48
121-1-2-1	1/36
121-1-1-2	1/72
122-2-2-1	1/45
122-2-1-2	1/90
122-1-2-2	1/120
12-201-2	1/6
12-20-21	-1/3
12-210-2	1/12
12-22-2-1	1/9
12-22-1-2	1/18
12-2-22-1	-1/3
12-2-2-12	1/6
12-2-11-1	-5/9
12-2-12-2	-17/72
12-2-1-22	11/72
12-2-1-11	2/9
12-100-2	1/24
12-11-2-1	1/18
12-11-1-2	1/36
12-12-2-2	1/48
12-1-21-1	-17/72
12-1-22-2	-7/72
12-1-2-22	1/18
12-1-2-11	5/72
12-1-11-2	1/12
12-1-1-21	-1/6
1-2002-1	-1
1-200-12	1/2
1-2011-1	3/8
1-2012-2	5/16
1-201-22	-9/16
1-201-11	-11/8
1-2021-2	1/2
1-202-21	-1

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
1-20-212	1/6
1-20-102	1/4
1-2101-1	-7/16
1-2102-2	-5/32
1-210-22	7/32
1-210-11	11/16
1-2111-2	1/4
1-2120-2	1/16
1-21-202	-3/16
1-21-12-1	1/2
1-21-1-12	-1/2
1-2201-2	-1/2
1-2210-2	-1/4
1-222-1-2	-1/6
1-22-22-1	1
1-22-2-12	-1/2
1-22-11-1	1
1-22-12-2	3/8
1-22-1-22	-1/8
1-22-1-11	0
1-2-2012	1/18
1-2-2102	1/12
1-2-222-1	-1/3
1-2-22-12	1/6
1-2-2-122	1/24
1-2-1002	1/8
1-2-112-1	-1/2
1-2-11-12	1/4
1-2-121-1	1/24
1-2-122-2	1/12
1-2-12-22	-5/24
1-2-12-11	-13/24
1-2-1-222	1/16
1-2-1-112	1/12
1-1001-1	-1/2
1-1002-2	-15/128
1-100-22	5/128
1-1011-2	17/32
1-1020-2	11/64
1-10-202	3/64
1-10-1-12	5/32
1-1101-2	-7/8
1-1110-2	-3/8
1-112-1-2	-17/72
1-11-2-12	-7/24
1-11-11-1	2
1-11-12-2	71/96
1-11-1-22	-43/96
1-11-1-11	-3/4
1-1200-2	-5/32
1-121-1-2	-7/72
1-122-2-2	-9/128
1-12-21-1	31/48
1-12-22-2	83/384
1-12-2-22	-41/384

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
1-12-2-11	-3/16
1-12-11-2	-3/8
1-1-2002	-1/32
1-1-21-12	-1/8
1-1-221-1	-11/48
1-1-222-2	-25/384
1-1-22-22	19/384
1-1-2-222	-1/128
1-1-2-112	-1/72
1-1-10-12	-3/8
1-1-111-1	-1/2
1-1-112-2	-19/96
1-1-11-22	23/96
1-1-121-2	5/24
1-1-1-212	-5/72
1-1-1-102	-1/8
20000-2	1/32
2001-1-2	1/48
2002-2-2	1/64
200-22-2	-1/16
200-2-22	1/32
200-11-2	1/16
2010-1-2	1/72
2011-2-2	1/96
201-21-2	1/24
201-10-2	1/48
2020-2-2	1/128
202-20-2	1/64
202-1-1-2	1/96
20-202-2	3/64
20-20-22	-1/64
20-211-2	-5/32
20-220-2	-1/16
20-2-1-12	1/32
20-101-2	1/8
20-110-2	1/16
20-12-1-2	1/24
20-1-2-12	1/8
20-1-12-2	-5/32
20-1-1-22	3/32
2100-1-2	1/108
2101-2-2	1/144
210-21-2	1/36
2110-2-2	1/192
211-1-1-2	1/144
212-2-1-2	1/180
212-1-2-2	1/240
21-201-2	1/12
21-22-1-2	1/36
21-2-2-12	1/12
21-2-12-2	-7/72
21-2-1-22	1/18
21-11-1-2	1/72
21-12-2-2	1/96
21-1-22-2	-11/288

$\underline{m}$	$C(\underline{m})$
$\lvert\underline{m}\rvert = 6$	
21-1-2-22	5/288
21-1-11-2	1/24
2200-2-2	1/256
221-1-2-2	1/320
222-2-2-2	1/384
22-22-2-2	1/128
22-2-22-2	-7/256
22-2-2-22	3/256
22-2-11-2	1/32
22-11-2-2	1/192
22-1-21-2	1/48
2-2002-2	-1/64
2-2011-2	11/64
2-20-1-12	5/64
2-2101-2	-3/8
2-21-2-12	-1/12
2-21-12-2	49/192
2-21-1-22	-9/64
2-22-22-2	1/16
2-22-2-22	-3/128
2-22-11-2	-5/32
2-2-21-12	-3/32
2-2-222-2	-1/64
2-2-10-12	-1/4
2-2-112-2	-17/192
2-2-121-2	1/24
2-1001-2	1/4
2-10-2-12	1/4
2-11-11-2	1/8
2-12-21-2	1/12
2-1-221-2	-1/4
2-1-111-2	-3/8

Anhang B

Effektive Hüpfamplituden für die Spinkette

Hier sind die effektiven Hüpfamplituden angegeben, wie sie in Gl. (2.14) des Abschnitts 2.2 erscheinen. Wir substituierten $\overline{\alpha} = 1 - 2\alpha$ und $\overline{\lambda} = \frac{1}{4}\lambda$.

$$
\begin{aligned}
a_0 - E_0 = 1 &- \left(4 - 3\overline{\alpha}^2\right)\overline{\lambda}^2 - \left(8 - 8\overline{\alpha} - 6\overline{\alpha}^2 + 3\overline{\alpha}^3\right)\overline{\lambda}^3 - \left(2 - 24\overline{\alpha} + 5\overline{\alpha}^2 + 8\overline{\alpha}^3 + \frac{13}{4}\overline{\alpha}^4\right)\overline{\lambda}^4 + \Big(56 - 82\overline{\alpha} - 22\overline{\alpha}^2 \\
&+ 55\overline{\alpha}^3 - 39\overline{\alpha}^4 + 20\overline{\alpha}^5\Big)\overline{\lambda}^5 + \left(\frac{367}{3} - \frac{7328}{9}\overline{\alpha} + \frac{22976}{27}\overline{\alpha}^2 + \frac{6442}{27}\overline{\alpha}^3 - \frac{28895}{54}\overline{\alpha}^4 + 193\overline{\alpha}^5 - 32\overline{\alpha}^6\right)\overline{\lambda}^6 - \Big(+ \frac{1880}{3} \\
&+ \frac{33622}{27}\overline{\alpha} - \frac{178529}{27}\overline{\alpha}^2 + \frac{37732}{9}\overline{\alpha}^3 + \frac{272111}{108}\overline{\alpha}^4 - \frac{1533503}{648}\overline{\alpha}^5 + \frac{3795}{16}\overline{\alpha}^6 + \frac{1215}{32}\overline{\alpha}^7\Big)\overline{\lambda}^7 - \Big(+ \frac{239515}{54} - \frac{1113653}{81}\overline{\alpha} \\
&- \frac{5784925}{972}\overline{\alpha}^2 + \frac{18230383}{486}\overline{\alpha}^3 - \frac{10982815}{648}\overline{\alpha}^4 - \frac{11532997}{972}\overline{\alpha}^5 + \frac{3063187}{486}\overline{\alpha}^6 + \frac{7237}{8}\overline{\alpha}^7 - \frac{18355}{64}\overline{\alpha}^8\Big)\overline{\lambda}^8 - \Big(\frac{125686}{27} \\
&- \frac{76583479}{972}\overline{\alpha} + \frac{68752369}{405}\overline{\alpha}^2 - \frac{21234271}{1944}\overline{\alpha}^3 - \frac{11364650857}{58320}\overline{\alpha}^4 + \frac{3801041717}{38880}\overline{\alpha}^5 + \frac{791308537}{25920}\overline{\alpha}^6 - \frac{6631910951}{466560}\overline{\alpha}^7 \\
&- \frac{35993}{8}\overline{\alpha}^8 + \frac{117967}{256}\overline{\alpha}^9\Big)\overline{\lambda}^9 + \Big(\frac{297928291}{4860} - \frac{3734645489}{97200}\overline{\alpha} - \frac{203195444791}{243000}\overline{\alpha}^2 + \frac{1619026599587}{972000}\overline{\alpha}^3 \\
&- \frac{6374076322571}{17496000}\overline{\alpha}^4 - \frac{40479077041931}{34992000}\overline{\alpha}^5 + \frac{16024252095257}{23328000}\overline{\alpha}^6 + \frac{468970409671}{7776000}\overline{\alpha}^7 - \frac{6400139186399}{93312000}\overline{\alpha}^8 \\
&- \frac{4993267}{1024}\overline{\alpha}^9 - \frac{3164523}{4096}\overline{\alpha}^{10}\Big)\overline{\lambda}^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_1 = {} & -2\overline{\alpha}\,\overline{\lambda} - 4\overline{\lambda}^2 - \Big(8 - 8\overline{\alpha} - 2\overline{\alpha}^3\Big)\overline{\lambda}^3 + \Big(4 + 20\overline{\alpha} - 24\overline{\alpha}^2 + 10\overline{\alpha}^3 - 5\overline{\alpha}^4\Big)\overline{\lambda}^4 + \Big(92 - \frac{499}{3}\overline{\alpha} - \frac{164}{3}\overline{\alpha}^2 + 152\overline{\alpha}^3 \\
& - 47\overline{\alpha}^4 + \frac{13}{2}\overline{\alpha}^5\Big)\overline{\lambda}^5 + \Big(\frac{532}{3} - \frac{11906}{9}\overline{\alpha} + \frac{11960}{9}\overline{\alpha}^2 + \frac{1648}{3}\overline{\alpha}^3 - \frac{41357}{54}\overline{\alpha}^4 + 85\overline{\alpha}^5 + 6\overline{\alpha}^6\Big)\overline{\lambda}^6 - \Big(\frac{9286}{9} + \frac{50927}{27}\overline{\alpha} \\
& - 10471\overline{\alpha}^2 + \frac{525563}{81}\overline{\alpha}^3 + \frac{300433}{81}\overline{\alpha}^4 - \frac{1847831}{648}\overline{\alpha}^5 - \frac{347}{8}\overline{\alpha}^6 + \frac{1349}{32}\overline{\alpha}^7\Big)\overline{\lambda}^7 - \Big(\frac{20357}{3} - \frac{595796}{27}\overline{\alpha} - \frac{1388737}{162}\overline{\alpha}^2 \\
& + \frac{59254049}{972}\overline{\alpha}^3 - \frac{20081239}{648}\overline{\alpha}^4 - \frac{2249917}{144}\overline{\alpha}^5 + \frac{9108755}{972}\overline{\alpha}^6 + \frac{42689}{64}\overline{\alpha}^7 - \frac{8375}{128}\overline{\alpha}^8\Big)\overline{\lambda}^8 - \Big(\frac{484369}{108} - \frac{2329343161}{19440}\overline{\alpha} \\
& + \frac{900291857}{3240}\overline{\alpha}^2 - \frac{1832504927}{72900}\overline{\alpha}^3 - \frac{197903346523}{583200}\overline{\alpha}^4 + \frac{218403875491}{1166400}\overline{\alpha}^5 + \frac{20115444349}{388800}\overline{\alpha}^6 - \frac{171159223337}{4665600}\overline{\alpha}^7 \\
& - \frac{360275}{256}\overline{\alpha}^8 - \frac{84629}{1024}\overline{\alpha}^9\Big)\overline{\lambda}^9 + \Big(\frac{1085746727}{9720} - \frac{2122034951}{16200}\overline{\alpha} - \frac{758082307651}{583200}\overline{\alpha}^2 + \frac{8192277619277}{2916000}\overline{\alpha}^3 \\
& - \frac{3663738649}{5832}\overline{\alpha}^4 - \frac{72485272140613}{34992000}\overline{\alpha}^5 + \frac{10556249531023}{8748000}\overline{\alpha}^6 + \frac{13425531369271}{69984000}\overline{\alpha}^7 - \frac{8409296181269}{46656000}\overline{\alpha}^8 + \frac{338383}{512}\overline{\alpha}^9 \\
& - \frac{523491}{1024}\overline{\alpha}^{10}\Big)\overline{\lambda}^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_2 = {} & -\overline{\alpha}^2\overline{\lambda}^2 - \Big(4\overline{\alpha}^2 - 2\overline{\alpha}^3\Big)\overline{\lambda}^3 + \Big(6 - 4\overline{\alpha} - 23\overline{\alpha}^2 + 14\overline{\alpha}^3 - \frac{1}{2}\overline{\alpha}^4\Big)\overline{\lambda}^4 + \Big(36 - \frac{272}{3}\overline{\alpha} - \frac{220}{3}\overline{\alpha}^2 + \frac{1150}{9}\overline{\alpha}^3 - 9\overline{\alpha}^4 \\
& - \frac{13}{2}\overline{\alpha}^5\Big)\overline{\lambda}^5 + \Big(\frac{107}{3} - \frac{1630}{3}\overline{\alpha} + \frac{1126}{3}\overline{\alpha}^2 + \frac{5102}{9}\overline{\alpha}^3 - \frac{13205}{36}\overline{\alpha}^4 - 59\overline{\alpha}^5 + 11\overline{\alpha}^6\Big)\overline{\lambda}^6 - \Big(\frac{5392}{9} + \frac{8356}{27}\overline{\alpha} - 3683\overline{\alpha}^2 \\
& + \frac{111805}{54}\overline{\alpha}^3 + \frac{11521}{6}\overline{\alpha}^4 - \frac{112711}{108}\overline{\alpha}^5 - \frac{529}{4}\overline{\alpha}^6 - \frac{177}{8}\overline{\alpha}^7\Big)\overline{\lambda}^7 - \Big(\frac{321349}{108} - \frac{2056121}{162}\overline{\alpha} + \frac{432835}{108}\overline{\alpha}^2 + \frac{209889}{8}\overline{\alpha}^3 \\
& - \frac{1611250}{81}\overline{\alpha}^4 - \frac{21930149}{3888}\overline{\alpha}^5 + \frac{29516069}{5184}\overline{\alpha}^6 - \frac{20115}{64}\overline{\alpha}^7 + \frac{33079}{256}\overline{\alpha}^8\Big)\overline{\lambda}^8 + \Big(\frac{232753}{108} + \frac{267867257}{4860}\overline{\alpha} - \frac{218164201}{1215}\overline{\alpha}^2 \\
& + \frac{1126486577}{19440}\overline{\alpha}^3 + \frac{8304895129}{38880}\overline{\alpha}^4 - \frac{34937501123}{233280}\overline{\alpha}^5 - \frac{114325837}{3645}\overline{\alpha}^6 + \frac{8015732987}{233280}\overline{\alpha}^7 - \frac{245923}{128}\overline{\alpha}^8 + \frac{34275}{256}\overline{\alpha}^9\Big)\overline{\lambda}^9 \\
& + \Big(\frac{730577017}{9720} - \frac{46788522763}{291600}\overline{\alpha} - \frac{412573481101}{583200}\overline{\alpha}^2 + \frac{528631437961}{291600}\overline{\alpha}^3 - \frac{704908007537}{1749600}\overline{\alpha}^4 - \frac{10700788289807}{6998400}\overline{\alpha}^5 \\
& + \frac{3068696176973}{3499200}\overline{\alpha}^6 + \frac{1425609063019}{6998400}\overline{\alpha}^7 - \frac{3134853822317}{18662400}\overline{\alpha}^8 + \frac{330479}{256}\overline{\alpha}^9 + \frac{361255}{512}\overline{\alpha}^{10}\Big)\overline{\lambda}^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_3 = {} & -\overline{\alpha}^3\overline{\lambda}^3 - \Big(\frac{10}{3}\overline{\alpha}^2 + 4\overline{\alpha}^3 - 2\overline{\alpha}^4\Big)\overline{\lambda}^4 - \Big(\frac{19}{3}\overline{\alpha} + 20\overline{\alpha}^2 - \frac{10}{3}\overline{\alpha}^3 - 11\overline{\alpha}^4 - 3\overline{\alpha}^5\Big)\overline{\lambda}^5 - \Big(\frac{58}{3} + \frac{104}{3}\overline{\alpha} - \frac{224}{9}\overline{\alpha}^2 - 63\overline{\alpha}^3 \\
& + \frac{103}{2}\overline{\alpha}^4 - \frac{57}{2}\overline{\alpha}^5 + \frac{81}{4}\overline{\alpha}^6\Big)\overline{\lambda}^6 - \Big(194 - \frac{3337}{9}\overline{\alpha} - \frac{2695}{6}\overline{\alpha}^2 + \frac{25781}{27}\overline{\alpha}^3 + \frac{120359}{324}\overline{\alpha}^4 - \frac{1051337}{1296}\overline{\alpha}^5 + \frac{3545}{16}\overline{\alpha}^6 \\
& - \frac{1821}{64}\overline{\alpha}^7\Big)\overline{\lambda}^7 - \Big(\frac{9833}{18} - \frac{85795}{18}\overline{\alpha} + \frac{134473}{27}\overline{\alpha}^2 + \frac{645941}{72}\overline{\alpha}^3 - \frac{12463261}{1296}\overline{\alpha}^4 - \frac{741083}{162}\overline{\alpha}^5 + \frac{4403075}{864}\overline{\alpha}^6 - \frac{2735}{8}\overline{\alpha}^7 \\
& - \frac{2255}{32}\overline{\alpha}^8\Big)\overline{\lambda}^8 + \Big(\frac{334339}{108} + \frac{5330302}{405}\overline{\alpha} - \frac{116771051}{1620}\overline{\alpha}^2 + \frac{318611839}{9720}\overline{\alpha}^3 + \frac{10959078839}{116640}\overline{\alpha}^4 - \frac{3602745371}{58320}\overline{\alpha}^5 \\
& - \frac{3565393159}{116640}\overline{\alpha}^6 + \frac{19619823353}{933120}\overline{\alpha}^7 + \frac{312315}{256}\overline{\alpha}^8 - \frac{194167}{512}\overline{\alpha}^9\Big)\overline{\lambda}^9 + \Big(\frac{14764517}{486} - \frac{15058025141}{145800}\overline{\alpha} - \frac{366538856671}{1749600}\overline{\alpha}^2 \\
& + \frac{10986227951}{14580}\overline{\alpha}^3 - \frac{57426582397}{273375}\overline{\alpha}^4 - \frac{3057153882031}{4374000}\overline{\alpha}^5 + \frac{27551656747661}{69984000}\overline{\alpha}^6 + \frac{2296156302973}{17496000}\overline{\alpha}^7 \\
& - \frac{2853844184699}{34992000}\overline{\alpha}^8 - \frac{3441299}{512}\overline{\alpha}^9 + \frac{458531}{1024}\overline{\alpha}^{10}\Big)\overline{\lambda}^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_4 = &-\frac{5}{4}\bar\alpha^4\bar\lambda^4 - \left(\frac{40}{9}\bar\alpha^3 + 6\bar\alpha^4 - 3\bar\alpha^5\right)\bar\lambda^5 + \left(\frac{11}{3}\bar\alpha^2 - \frac{827}{27}\bar\alpha^3 - \frac{1127}{36}\bar\alpha^4 + \frac{91}{4}\bar\alpha^5 + \frac{73}{16}\bar\alpha^6\right)\bar\lambda^6 + \left(\frac{118}{3}\bar\alpha + \frac{1457}{54}\bar\alpha^2\right. \\
&\left. - \frac{118427}{324}\bar\alpha^3 - \frac{8008}{81}\bar\alpha^4 + \frac{25312}{81}\bar\alpha^5 + \frac{235}{8}\bar\alpha^6 - \frac{551}{16}\bar\alpha^7\right)\bar\lambda^7 + \left(\frac{2843}{36} + 392\bar\alpha - \frac{352573}{324}\bar\alpha^2 - \frac{1175575}{486}\bar\alpha^3 + \frac{1080359}{432}\bar\alpha^4\right. \\
&\left. + \frac{2499871}{1296}\bar\alpha^5 - \frac{18898273}{15552}\bar\alpha^6 - \frac{11623}{32}\bar\alpha^7 + \frac{11079}{256}\bar\alpha^8\right)\bar\lambda^8 + \left(\frac{4443}{4} - \frac{104623}{90}\bar\alpha - \frac{20614727}{1620}\bar\alpha^2 + \frac{2172596479}{291600}\bar\alpha^3\right. \\
&\left. + \frac{4779339503}{194400}\bar\alpha^4 - \frac{9373929449}{583200}\bar\alpha^5 - \frac{3712684897}{388800}\bar\alpha^6 + \frac{12674648923}{2332800}\bar\alpha^7 + \frac{36815}{64}\bar\alpha^8 + \frac{5535}{32}\bar\alpha^9\right)\bar\lambda^9 + \left(\frac{5675023}{1080}\right. \\
&- \frac{78550898}{2025}\bar\alpha - \frac{8984508869}{1166400}\bar\alpha^2 + \frac{1558501032613}{8748000}\bar\alpha^3 - \frac{313377077827}{3499200}\bar\alpha^4 - \frac{2381463959903}{11664000}\bar\alpha^5 + \frac{10667785465877}{69984000}\bar\alpha^6 \\
&\left. + \frac{239561320949}{5832000}\bar\alpha^7 - \frac{2823248259253}{69984000}\bar\alpha^8 + \frac{1281485}{512}\bar\alpha^9 - \frac{198571}{256}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_5 = &-\frac{7}{4}\bar\alpha^5\bar\lambda^5 - \left(\frac{497}{54}\bar\alpha^4 + 10\bar\alpha^5 - 5\bar\alpha^6\right)\bar\lambda^6 - \left(\frac{2029}{108}\bar\alpha^3 + \frac{22585}{324}\bar\alpha^4 + \frac{25615}{1296}\bar\alpha^5 - \frac{689}{16}\bar\alpha^6 - \frac{495}{64}\bar\alpha^7\right)\bar\lambda^7 \\
&- \left(\frac{17609}{270}\bar\alpha^2 + \frac{261667}{1620}\bar\alpha^3 + \frac{228493}{1620}\bar\alpha^4 - \frac{135707}{2160}\bar\alpha^5 - \frac{2478733}{19440}\bar\alpha^6 - \frac{3501}{64}\bar\alpha^7 + \frac{8707}{128}\bar\alpha^8\right)\bar\lambda^8 - \left(\frac{517513}{2160}\bar\alpha\right. \\
&+ \frac{11684653}{16200}\bar\alpha^2 - \frac{4361227}{3240}\bar\alpha^3 - \frac{61140379}{145800}\bar\alpha^4 + \frac{2042902999}{583200}\bar\alpha^5 - \frac{768073523}{1166400}\bar\alpha^6 - \frac{3693169}{1800}\bar\alpha^7 + \frac{101075}{128}\bar\alpha^8 \\
&\left. - \frac{98103}{1024}\bar\alpha^9\right)\bar\lambda^9 - \left(\frac{392029}{1080} + \frac{18353873}{5400}\bar\alpha - \frac{1852245287}{324000}\bar\alpha^2 - \frac{5457180313}{243000}\bar\alpha^3 + \frac{228705995377}{5832000}\bar\alpha^4\right. \\
&\left. + \frac{630052860623}{17496000}\bar\alpha^5 - \frac{1316486173177}{23328000}\bar\alpha^6 - \frac{848047835389}{69984000}\bar\alpha^7 + \frac{1525746201613}{69984000}\bar\alpha^8 - \frac{363711}{256}\bar\alpha^9 - \frac{95505}{256}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_6 = &-\frac{21}{8}\bar\alpha^6\bar\lambda^6 - \left(\frac{1312}{81}\bar\alpha^5 + \frac{35}{2}\bar\alpha^6 - \frac{35}{4}\bar\alpha^7\right)\bar\lambda^7 - \left(\frac{32699}{1296}\bar\alpha^4 + \frac{6569}{48}\bar\alpha^5 + \frac{366337}{5184}\bar\alpha^6 - \frac{5423}{64}\bar\alpha^7 - \frac{3249}{256}\bar\alpha^8\right)\bar\lambda^8 \\
&+ \left(\frac{466121}{8100}\bar\alpha^3 - \frac{11335837}{48600}\bar\alpha^4 - \frac{87054037}{72900}\bar\alpha^5 - \frac{14827369}{194400}\bar\alpha^6 + \frac{374380847}{388800}\bar\alpha^7 + \frac{5919}{64}\bar\alpha^8 - 134\bar\alpha^9\right)\bar\lambda^9 \\
&+ \left(\frac{6893381}{14400}\bar\alpha^2 + \frac{252382259}{324000}\bar\alpha^3 - \frac{3243929987}{583200}\bar\alpha^4 - \frac{33830090063}{4374000}\bar\alpha^5 + \frac{201475508639}{23328000}\bar\alpha^6 + \frac{115086935947}{17496000}\bar\alpha^7\right. \\
&\left. - \frac{942482832577}{279936000}\bar\alpha^8 - \frac{647179}{384}\bar\alpha^9 + \frac{1315703}{6144}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_7 = &-\frac{33}{8}\bar\alpha^7\bar\lambda^7 - \left(\frac{29761}{972}\bar\alpha^6 + \frac{63}{2}\bar\alpha^7 - \frac{63}{4}\bar\alpha^8\right)\bar\lambda^8 - \left(\frac{425921}{5184}\bar\alpha^5 + \frac{13466957}{46656}\bar\alpha^6 + \frac{6057589}{62208}\bar\alpha^7 - \frac{43201}{256}\bar\alpha^8\right. \\
&\left. - \frac{21071}{1024}\bar\alpha^9\right)\bar\lambda^9 - \left(\frac{167201561}{972000}\bar\alpha^4 + \frac{5159789783}{5832000}\bar\alpha^5 + \frac{13606825633}{8748000}\bar\alpha^6 - \frac{4975561379}{23328000}\bar\alpha^7 - \frac{86819286497}{69984000}\bar\alpha^8\right. \\
&\left. - \frac{153907}{1024}\bar\alpha^9 + \frac{543077}{2048}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
a_8 = &-\frac{429}{64}\bar\alpha^8\bar\lambda^8 - \left(\frac{41617}{729}\bar\alpha^7 + \frac{231}{4}\bar\alpha^8 - \frac{231}{8}\bar\alpha^9\right)\bar\lambda^9 - \left(\frac{32061679}{186624}\bar\alpha^6 + \frac{331318297}{559872}\bar\alpha^7 + \frac{465876163}{2239488}\bar\alpha^8\right. \\
&\left. - \frac{347007}{1024}\bar\alpha^9 - \frac{133825}{4096}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
\end{aligned}
$$

$$
a_9 = -\frac{715}{64}\bar\alpha^9\bar\lambda^9 - \left(\frac{7560737}{69984}\bar\alpha^8 + \frac{429}{4}\bar\alpha^9 - \frac{429}{8}\bar\alpha^{10}\right)\bar\lambda^{10}
$$

$$
a_{10} = -\frac{2431}{128}\bar\alpha^{10}\bar\lambda^{10}
$$

Literaturverzeichnis

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

[2] J. Stein, J. Stat. Phys. **88**, 487 (1997).

[3] G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **79**, 163 (1997).

[4] L. P. Regnault *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 5579 (1996).

[5] J. Stoer und R. Bulirsch, *Einführung in die Numerische Mathematik II* (Springer-Verlag, Berlin, 1973).

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

[7] J. W. Bray, L. V. Interrante, I. C. Jacobs, und J. C. Bonner, in *Extended Linear Chain Compounds*, herausgegeben von J. S. Miller (Plenum Press, New York, 1983), Band 3, S. 353.

[8] W. Geertsma und D. Khomskii, Phys. Rev. B **54**, 3011 (1996).

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

[10] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 3046 (1997).

[11] A. W. Garrett *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 745 (1997).

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

[13] G. S. Uhrig und H. J. Schulz, Phys. Rev. B **54**, R9624 (1996).

[14] J. L. Black und V. J. Emery, Phys. Rev. B **23**, 429 (1981).

[15] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz, und T. Ziman, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 511 (1989).

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

[17] T. Barnes, J. Riera, und D. A. Tennant, cond-mat/9801224.

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

[19] Z. Weihong, V. Kotov, und J. Oitmaa, Phys. Rev. B **57**, 11439 (1998).

[20] G. S. Uhrig, F. Schönfeld, M. Laukamp, und E. Dagotto, Eur. Phys. J. B **7**, 67 (1999).

[21] R. Chitra *et al.*, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995).

[22] S. R. White und I. Affleck, Phys. Rev. B **54**, 9862 (1996).

[23] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, 4925 (1982).

[24] D. L. Hunter und J. G. A. Baker, Phys. Rev. B **19**, 3808 (1978).

[25] M. E. Fisher und H. Au-Yang, J. Phys. A: Math. Gen. **12**, 1677 (1978).

[26] A. J. Guttmann und G. S. Joyce, J. Phys. A: Math. Gen. **5**, L81 (1972).

[27] C. D. Domb und J. L. Lebowitz, *Phase Transition and Critical Phenomena* (Academic Press, New York, 1989), Band 13.

[28] L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **22**, 1405 (1980).

[29] M. E. Fisher und R. M. Kerr, Phys. Rev. Lett. **39**, 667 (1977).

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

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

[32] E. Müller-Hartmann und G. S. Uhrig, in Vorbereitung (1999).

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

[34] W. J. Caspers, K. M. Emmett, und W. Magnus, J. Phys. A: Math. Gen. **88A**, 103 (1982).

[35] S. Brehmer, A. K. Kolezhuk, H. Mikeska, und U. Neugebauer, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 1103 (1998).

[36] J. E. Lorenzo *et al.*, Phys. Rev. B **50**, 1278 (1994).

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

[38] G. Castilla, S. Chakravarty, und V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **75**, 1823 (1995).

[39] S. Haas und E. Dagotto, Phys. Rev. B **52**, R14396 (1995).

[40] H. Kuroe *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 409 (1997).

[41] K. Okamoto und K. Nomura, Phys. Lett. **A169**, 433 (1992).

[42] R. Jullien und F. D. M. Haldane, Bull. Am. Phys. Soc. **28**, 344 (1983).

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

[44] H. Hori *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 18 (1994).

[45] K. Fabricius *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 1102 (1998).

[46] P. H. M. van Loosdrecht *et al.*, Phys. Rev. B **54**, R3730 (1996).

[47] J. P. Boucher und L. P. Regnault, J. Phys. I France **6**, 1939 (1996).

[48] K. Hirota *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 736 (1994).

[49] M. Braden *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 1105 (1996).

[50] D. Khomskii, W. Geertsma, und M. Mostovoy, Czech. Journ. of Physics **46**, 3239 (1996).

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

[52] B. Büchner, H. Fehske, A. P. Kampf, und G. Wellein, Physica **B 261**, 956 (1999).

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