

---

Effektive Spinmodelle  
für Spin-Phonon-Ketten  
mittels Flussgleichungen

---

Diplomarbeit  
Carsten Raas

Institut für Theoretische Physik  
Universität zu Köln  
Juli 2000



## Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                       |           |
|----------|-----------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                                     | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Motivation</b>                                                     | <b>3</b>  |
| 2.1      | Frustrierte $S = 1/2$ Heisenbergkette . . . . .                       | 4         |
| 2.2      | Allgemeines zu $\text{CuGeO}_3$ . . . . .                             | 6         |
| 2.3      | Spin-Phonon-Kopplung und Spin-Peierls-Übergang . . . . .              | 8         |
| 2.4      | Nichtadiabatische Beschreibung von $\text{CuGeO}_3$ . . . . .         | 12        |
| <b>3</b> | <b>Flussgleichungsmethode</b>                                         | <b>15</b> |
| 3.1      | Grundlagen der Flussgleichungen . . . . .                             | 15        |
| 3.2      | Alternativer Generator . . . . .                                      | 21        |
| 3.3      | Anwendung auf Modelle mit Phonon-Kopplung . . . . .                   | 23        |
| <b>4</b> | <b>Effektive Spinmodelle</b>                                          | <b>25</b> |
| 4.1      | Modell . . . . .                                                      | 25        |
| 4.2      | Flussgleichungen . . . . .                                            | 28        |
| 4.3      | Implementierung . . . . .                                             | 34        |
| 4.4      | Ordnung $\mathcal{L}(\mathbf{M}_5)$ . . . . .                         | 38        |
| 4.4.1    | Vorbereitungen . . . . .                                              | 38        |
| 4.4.2    | Bisherige Arbeiten . . . . .                                          | 39        |
| 4.4.3    | Lokale Kopplung . . . . .                                             | 42        |
| 4.4.4    | Ergebnisse und Analyse . . . . .                                      | 45        |
| 4.4.5    | Lineare Spinwellentheorie: Einbeziehung von $J_3$ und $J_4$ . . . . . | 57        |
| 4.5      | Ordnung $\mathcal{L}^2(\mathbf{M}_{24})$ . . . . .                    | 65        |
| 4.5.1    | Vorbereitungen . . . . .                                              | 65        |
| 4.5.2    | Ergebnisse . . . . .                                                  | 66        |
| 4.6      | Alternativer Generator: Spin-Boson-Kopplung . . . . .                 | 70        |
| <b>5</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                                   | <b>73</b> |
|          | <b>Anhang</b>                                                         | <b>77</b> |
|          | <b>Literaturverzeichnis</b>                                           | <b>87</b> |

|                                                              |           |
|--------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Anhang</b>                                                | <b>77</b> |
| <b>A Allgemeines</b>                                         | <b>77</b> |
| A.1 Kommutator $[\eta, \mathcal{H}]$ . . . . .               | 77        |
| A.2 Allgemeine Differenzialgleichungen . . . . .             | 78        |
| <b>B Ordnung <math>\mathcal{L}</math></b>                    | <b>79</b> |
| B.1 Differenzialgleichungen mittels $\mathbf{M}_5$ . . . . . | 79        |
| <b>C Ordnung <math>\mathcal{L}^2</math></b>                  | <b>81</b> |
| C.1 Operratorraum . . . . .                                  | 81        |
| C.2 Matrix $\mathbf{M}_{24}$ . . . . .                       | 82        |
| <b>D Gegenüberstellung der Phasendiagramme</b>               | <b>83</b> |
| <b>Literaturverzeichnis</b>                                  | <b>87</b> |

## Abbildungsverzeichnis

|    |                                                                                                      |    |
|----|------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1  | Frustration durch Übernächstnachbar-Wechselwirkung . . . . .                                         | 4  |
| 2  | Néel- und RVB-Zustand . . . . .                                                                      | 5  |
| 3  | Kristallstruktur von $\text{CuGeO}_3$ . . . . .                                                      | 7  |
| 4  | Austauschkopplung $J$ als Funktion von $\eta$ . . . . .                                              | 8  |
| 5  | Superaustausch in $\text{CuGeO}_3$ . . . . .                                                         | 8  |
| 6  | Dimerisierung eines Spin-Peierls-Systems . . . . .                                                   | 9  |
| 7  | Phasendiagramm von $\text{CuGeO}_3$ . . . . .                                                        | 10 |
| 8  | Spin-Peierls-Instabilität . . . . .                                                                  | 11 |
| 9  | Schema: Flussgleichungsmethode . . . . .                                                             | 18 |
| 10 | Resultate bisheriger Arbeiten . . . . .                                                              | 41 |
| 11 | Phasendiagramm für lokale Kopplung . . . . .                                                         | 44 |
| 12 | Fluss der Koeffizienten in Ordnung $\mathcal{L}$ für $J = 0.6$ und $g = 0.3$ . . . . .               | 46 |
| 13 | Phasendiagramm in Ordnung $\mathcal{L}$ . . . . .                                                    | 47 |
| 14 | Phononfrequenz $\omega$ in Abhängigkeit von $g$ für feste Werte von $J$ . . . . .                    | 49 |
| 15 | Frustration $\alpha$ in Abhängigkeit von $g$ für feste Werte von $J$ . . . . .                       | 50 |
| 16 | Frustration $\alpha(g)$ für feste $J$ bei $\omega \equiv \text{const.}$ und $\mu \equiv 0$ . . . . . | 51 |
| 17 | Fluss für $J = 0.6$ und $g = 0.45281595$ bzw. $g = 0.45281600$ . . . . .                             | 53 |
| 18 | Eigenwert $\tilde{\lambda}_1(\ell)$ für $J = 0.6$ und verschiedene $g$ . . . . .                     | 54 |
| 19 | Fit der $\ell$ -Abhängigkeiten der Kopplungen . . . . .                                              | 56 |
| 20 | Zur Spinrotation auf dem $\downarrow$ -Untergitter . . . . .                                         | 60 |
| 21 | Phasendiagramm in Ordnung $\mathcal{L}$ , LSW . . . . .                                              | 62 |
| 22 | Phasendiagramm in Ordnung $\mathcal{L}$ , modifizierte FGen, LSW . . . . .                           | 63 |
| 23 | Phasendiagramm in Ordnung $\mathcal{L}$ , voller Spinanteil, LSW . . . . .                           | 64 |
| 24 | Fluss in Ordnung $\mathcal{L}^2$ für $J = 0.2$ und $g = 0.25$ . . . . .                              | 67 |
| 25 | Phasendiagramm in Ordnung $\mathcal{L}^2$ . . . . .                                                  | 68 |
| 26 | Fluss in Ordnung $\mathcal{L}^2$ für $J = 0.45$ und $g = 0.25$ . . . . .                             | 69 |
| 27 | Phasendiagramm mittels $\eta = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$ . . . . .                                 | 71 |
| 28 | Übersicht: Andere Arbeiten . . . . .                                                                 | 83 |
| 29 | Übersicht: Ordnung $\mathcal{L}$ , LSW . . . . .                                                     | 83 |
| 30 | Übersicht: Ordnung $\mathcal{L}$ . . . . .                                                           | 83 |
| 31 | Übersicht: Ordnung $\mathcal{L}$ , modifizierte FGen, LSW . . . . .                                  | 83 |
| 32 | Übersicht: Ordnung $\mathcal{L}^2$ . . . . .                                                         | 83 |
| 33 | Übersicht: Ordnung $\mathcal{L}$ , voller Spinanteil, LSW . . . . .                                  | 83 |

## Tabellenverzeichnis

|   |                                                                                  |    |
|---|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1 | Vergleich einer organischen Spin-Peierls-Substanz und $\text{CuGeO}_3$ . . . . . | 13 |
|---|----------------------------------------------------------------------------------|----|



# 1 Einleitung

Niedrigdimensionale Quantenspinsysteme sind seit langem ein Gebiet intensiver Forschung sowohl von theoretischer als auch von experimenteller Seite. Eine Einschränkung der Freiheitsgrade beziehungsweise der Wechselwirkungen auf ein oder zwei Raumdimensionen führt bei tiefen Temperaturen zu ungewöhnlichen Phänomenen. Quantenfluktuationen und Korrelationen spielen eine wichtigere Rolle im Verständnis ein- oder zweidimensionaler Systeme, als es bei höherdimensionalen Vielteilchensystemen der Fall ist. Treten bei kleinem Spin  $S = 1/2$  die quantenmechanischen Eigenschaften des Systems stärker hervor, sind die Korrelationen besonders stark.

Die Kopplung der Spinfreiheitsgrade an das umgebende Kristallgitter kann zur Brechung von Symmetrien führen. Die Spin-Peierls-Instabilität von eindimensionalen Spinsystemen ist das Analogon zur Peierls-Instabilität quasi-eindimensionaler Metalle. Diese zeigen eine Instabilität gegenüber einer Gittermodulation mit dem Wellenvektor  $2k_F$ , wobei  $k_F$  den Fermiwellenvektor bezeichnet. In der Nähe halber Bandfüllung führt dies zu einer Dimerisierung des Systems, d. h. zu einer alternierenden Verkürzung und Verlängerung der Abstände zwischen Gitterplätzen entlang der Kettenrichtung und damit zu einer Brechung der Translationssymmetrie. Da sich Fermi-Operatoren in einer Dimension durch eine Jordan-Wigner-Transformation auf Spinoperatoren abbilden lassen, ist es nicht verwunderlich, dass auch eindimensionale Spinsysteme einen analogen Effekt zeigen. So ist der Spin-Peierls-Übergang ein Phasenübergang, der aus der Instabilität des eindimensionalen Antiferromagneten gegenüber einer Dimerisierung resultiert. Der strukturelle Phasenübergang von einer unverzerrten in eine verzerrte Phase wird gewöhnlich in antiferromagnetischen  $S = 1/2$ -Ketten mit isotroper Spin-Spin-Wechselwirkung beobachtet. Er wird induziert durch die Kopplung der Spinfreiheitsgrade an die Freiheitsgrade des Gitters. Die Entdeckung der ersten anorganischen Spin-Peierls-Substanz Kupfergermanat ( $\text{CuGeO}_3$ ) durch Hase *et al.* 1993 [1] führte zu einem gesteigerten Interesse an der experimentellen und theoretischen Untersuchung solcher Systeme. Im Gegensatz zu den bis dahin bekannten organischen Spin-Peierls-Substanzen zeichnet sich das  $\text{CuGeO}_3$  durch eine vergleichsweise einfache Kristallstruktur aus, die das mikroskopische Verständnis vieler Eigenschaften erleichtert. Es bietet zudem die Möglichkeit, hochwertige einkristalline Proben herzustellen.

In der vorliegenden Arbeit wird eine antiferromagnetische spinisotrope  $S = 1/2$ -Heisenbergkette betrachtet, die um eine Ankopplung an dispersionslose Einstein-Phononen erweitert wird. Bisher wurde dazu meist eine adiabati-

sche Behandlung der Phononen vorgenommen. Der experimentelle Befund für  $\text{CuGeO}_3$  widerspricht jedoch den Voraussetzungen einer adiabatischen Näherung, sodass in dieser Arbeit ein antiadiabatischer Zugang gewählt wird [2]. Das Modell kann somit zur Beschreibung einer Spin-Peierls-Substanz wie  $\text{CuGeO}_3$  dienen.

Ziel der Arbeit ist es, aus dem Modell mit Spin-Phonon-Kopplung ein effektives Spinmodell herzuleiten. Dabei kommt die von *Wegner* 1994 [3] eingeführte Flussgleichungsmethode zur Anwendung. Durch eine Folge kontinuierlicher unitärer Transformationen wird der Anteil des Hamiltonoperators, der die Kopplung zwischen Spin- und Phononsystem beschreibt, weggedreht und man erhält ungekoppelte effektive Modelle für den Spin- und den Phononanteil des Hamiltonoperators. Nach der Entkopplung des magnetischen und des phononischen Subsystems enthalten die effektiven Modelle implizit die Gitterschwingungen. Man erhält für die Austauschkopplungen des Spinanteils effektive Werte. Es findet allerdings nicht nur eine Renormierung der Kopplungskonstanten des Ausgangshamiltonoperators statt. Im effektiven Spinmodell entstehen zusätzliche langreichweitige Spinkopplungen. In diesem Sinne induziert die Spin-Phonon-Kopplung Frustration. Prinzipiell sind die effektiven Kopplungen temperaturabhängig [2]. In der vorliegenden Arbeit beschränken sich die Untersuchungen auf den Grundzustand, sind aber in einfacher Weise auf endliche Temperaturen erweiterbar.

Die vorliegende Arbeit hat zwei einleitende Kapitel und einen Hauptteil.

In Abschnitt 2 werden allgemeine Eigenschaften frustrierter  $S = 1/2$ -Heisenbergketten und einige Besonderheiten der anorganischen Spin-Peierls-Substanz  $\text{CuGeO}_3$  zusammengestellt. Der Spin-Peierls-Übergang wird am Beispiel von  $\text{CuGeO}_3$  illustriert. Den Abschluss des Kapitels bildet die Motivierung eines antiadiabatischen Zugangs für  $\text{CuGeO}_3$ .

Kapitel 3 erläutert die Methode der Flussgleichungen. Die Flussgleichung wird abgeleitet und das Konvergenzverhalten des Verfahrens der kontinuierlichen unitären Transformationen untersucht. Es wird eine kurze Übersicht der bisherigen Arbeiten gegeben, in denen Modelle mit Phonon-Kopplung mittels der Flussgleichungsmethode untersucht wurden.

Im Hauptteil (Kapitel 4) wird diese auf ein an Phononen gekoppeltes Spinsystem angewendet. Es werden effektive Spinmodelle und damit effektive Austauschkopplungen hergeleitet. Dazu werden verschiedene Zugänge benutzt, deren Ergebnisse – insbesondere die erhaltenen Phasendiagramme – miteinander verglichen werden.

Der letzte Abschnitt fasst die Ergebnisse zusammen und gibt einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen.



## 2 Motivation

Die magnetischen Eigenschaften realer Substanzen können in vielen Fällen durch Quantenspinmodelle quantitativ verstanden werden. Das spinisotrope antiferromagnetische Heisenbergmodell

$$\mathcal{H}_{\text{Heis}} = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad \text{mit} \quad J > 0 \quad (2.1)$$

mit den Vektoroperatoren  $\mathbf{S}_i$  eines Spins  $1/2$  am Gitterplatz  $i$  ist dabei ein Grenzfall des Hubbardmodells bei halber Bandfüllung. Den Heisenbergantiferromagneten erhält man im Falle großer Wechselwirkung  $U$ , die für ein stark abgeschirmtes Coulombpotenzial steht, relativ zum Hüpfmatrixelement  $t$ , das die Übergangsamplitude von einem Atomorbital in ein benachbartes charakterisiert [4]

$$\mathcal{H}_{\text{Hub}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle; \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i (n_{i,\uparrow} - 1/2)(n_{i,\downarrow} - 1/2) \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Hub}} \xrightarrow{U \gg t} \mathcal{H}_{\text{Heis}} \quad \text{mit} \quad J = 4t^2/U. \quad (2.3)$$

Die  $c_{i,\sigma}^\dagger$  ( $c_{i,\sigma}$ ) sind die elektronischen Erzeuger (Vernichter) am Platz  $i$  zum Spin  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  und  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  ist der entsprechende Teilchenzahloperator. Die verbleibenden relevanten Freiheitsgrade eines solchen (Mott-Hubbard-) Isolators sind im Niederenergiebereich vor allem die magnetischen Freiheitsgrade des elektronischen Subsystems, d. h. der Spin der Elektronen. In der Spin-Spin-Wechselwirkung  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$ , angewendet auf entsprechende Spinzustände, ist der Beitrag der Austauschmatrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung enthalten, die für eine spontane Magnetisierung verantwortlich sind. Die frustrierte antiferromagnetische  $S = 1/2$ -Kette mit isotroper Spin-Spin-Wechselwirkung wird im nächsten Abschnitt besprochen.

Nimmt man zu den Spinfreiheitsgraden noch die Freiheitsgrade des Gitters, nämlich die Phononen sowie deren Kopplung an die Spins, zeigt sich eine starke Neigung der Spinkette zur Dimerisierung. Die magnetoelastische Kopplung induziert den so genannten *Spin-Peierls-Phasenübergang* (Kapitel 2.3). Ein prominenter Vertreter der Spin-Peierls-Systeme ist die anorganische Substanz  $\text{CuGeO}_3$ , die in Kapitel 2.2 vorgestellt wird. Beim  $\text{CuGeO}_3$  liegen die Winkel zwischen den Austauschpfaden nahe bei  $90^\circ$ , sodass die *Spin-Phonon-Kopplung* einen starken Einfluss auf die magnetische Kopplungskonstante  $J$  hat.

## 2.1 Frustrierte $S=1/2$ Heisenbergkette

Oft kann die Wechselwirkung in einer oder sogar zwei Raumrichtungen aufgrund einer stark anisotropen Kopplungskonstanten  $J$  vernachlässigt werden, sodass der im Allgemeinen dreidimensionale Systeme beschreibende Heisenberghamiltonoperator (2.1) dann zur Modellierung niedrigdimensionaler Quantenspinsysteme dient. Viele der in letzten Jahren eingehend experimentell und theoretisch untersuchten isolierenden Festkörper fallen in diese Klasse, z. B.  $\text{CuGeO}_3$  [1],  $\alpha'\text{-NaV}_2\text{O}_5$  [5],  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  [6],  $\text{KCuF}_3$  [7] oder  $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$  [8]. Die Eigenschaften solcher Substanzen hängen dabei nicht nur von der Koordinationszahl des Gitters und der Spingröße  $S$  ab, sondern auch von der jeweiligen Frustration.

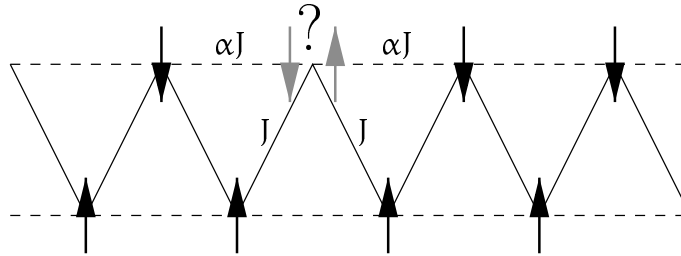


Abbildung 1: Frustration durch Übernächstnachbar-Wechselwirkung

Man spricht von *Frustration*, wenn sich die Spins *nicht* so in Untergitter  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{B}$  aufteilen lassen, dass die Wechselwirkung zwischen Spins desselben Untergitters (falls vorhanden) rein ferromagnetisch ist, während ein  $\mathcal{A}$ - mit einem  $\mathcal{B}$ -Spin (und umgekehrt) antiferromagnetisch wechselwirkt. Die in dieser Arbeit interessierende quasi-eindimensionale Substanz  $\text{CuGeO}_3$  lässt sich (unter Vernachlässigung von Zwischenkettenkopplungen, siehe Kapitel 2.2) über einen Heisenberghamiltonoperator mit Nächst- und Übernächstnachbar-Kopplung

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum (J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) \\ &= \sum J (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) \quad \text{mit } \alpha := J_2/J_1, J = J_1 \end{aligned} \quad (2.4)$$

beschreiben. Ausgehend vom klassischen Néelzustand, in dem alle Spins des Untergitters  $\mathcal{A}$  zu allen  $\mathcal{B}$ -Spins antiparallel stehen, kann man verstehen, wie die Übernächstnachbar-Wechselwirkung Frustration induziert und so den Néelzustand schwächt. In Abbildung 1 sind die Kopplungen der  $z$ -Komponenten der klassischen Spinvektoren  $\mathbf{S}_i$  für nächste Nachbarn zickzackförmig und für übernächste in Richtung der Holme dargestellt. Man

sieht, dass die für antiferromagnetische Kopplung  $J > 0$  energetisch begünstigte antiparallele Ausrichtung der Spins innerhalb einer Dreierschleife nicht mehr für alle drei Spins gleichzeitig erreicht werden kann. Die Frustration wird also in (2.4) erst durch eine Übernächstnachbar-Kopplung  $\alpha \neq 0$  hervorgerufen.

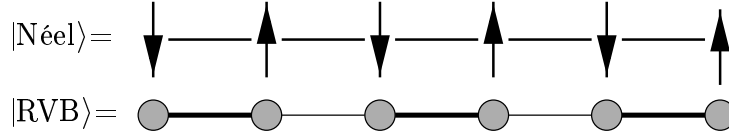


Abbildung 2: Néel- und RVB-Zustand

Im Néelzustand ist die endliche Untergittermagnetisierung  $\langle \mathbf{S}_A \rangle - \langle \mathbf{S}_B \rangle \neq 0$  Ausdruck einer langreichweitigen Ordnung, die die Symmetrie der Spinrotation spontan bricht. Der Néelzustand ist allerdings kein Grundzustand des eindimensionalen quantenmechanischen Systems, da die Spinkette keine endliche Untergittermagnetisierung erlaubt [9]. Bei endlichen Temperaturen zerstören in ein und zwei Dimensionen die bosonischen Fluktuationen die klassische Ordnung (Mermin-Wagner-Theorem [10]), sodass ein niedrigdimensionaler isotroper Heisenberg-Antiferromagnet keine langreichweitige magnetische Ordnung zeigt.

Von *Anderson* stammt der Vorschlag, den Grundzustand als *Resonating-Valence-Bond-Zustand* zu beschreiben [11]. Im RVB-Zustand paaren sich alle Spins (beim  $\text{CuGeO}_3$  die Spins auf den Cu-Plätzen) paarweise zu Valenzbindungssingulett. Die RVB-Wellenfunktion ergibt sich dann als gewichtete lineare Überlagerung aller RVB-Zustände, d. h. aller möglichen Gitterplatz-Paarungen zu Singulett [12]. Es handelt sich um ein kritisches System in dem Sinne, dass es instabil gegenüber  $2k_F$ -Störungen ist. So ist die magnetische Suszeptibilität maximal für eine Gittermodulation mit dem Wellenvektor  $2k_F$ . Eine energetische Anregung des RVB-Zustands ist z. B. das Aufbrechen einer Valenzbindung, was zur Bildung von zwei  $S = 1/2$ -Spinonen führt. In der undimerisierten Kette können sich diese  $S = 1/2$ -Spinonen asymptotisch, d. h. bei großen Abständen, frei bewegen.

Für die unfrustrierte Kette liegen exakte Ergebnisse sowohl für den Grundzustand (*Bethe* 1931 [13]) als auch für angeregte Zustände vor. Mit der Quantentransformmatrix-Methode wurde auch die Thermodynamik des Modells exakt bestimmt [14].

Im frustrierten Fall aber ist eine exakte allgemeine Lösung über den Bethe-Ansatz nicht möglich. Für eine Frustration  $\alpha = 1/2$ , dem Majumdar-Ghosh-Punkt [15–17], ist der Grundzustand allerdings bekannt. Es liegt

ein perfekter Singulettproduktzustand mit kurzreichweitiger Nächstnachbar-Korrelation vor. Bereits bei Werten für die Frustration, die größer als

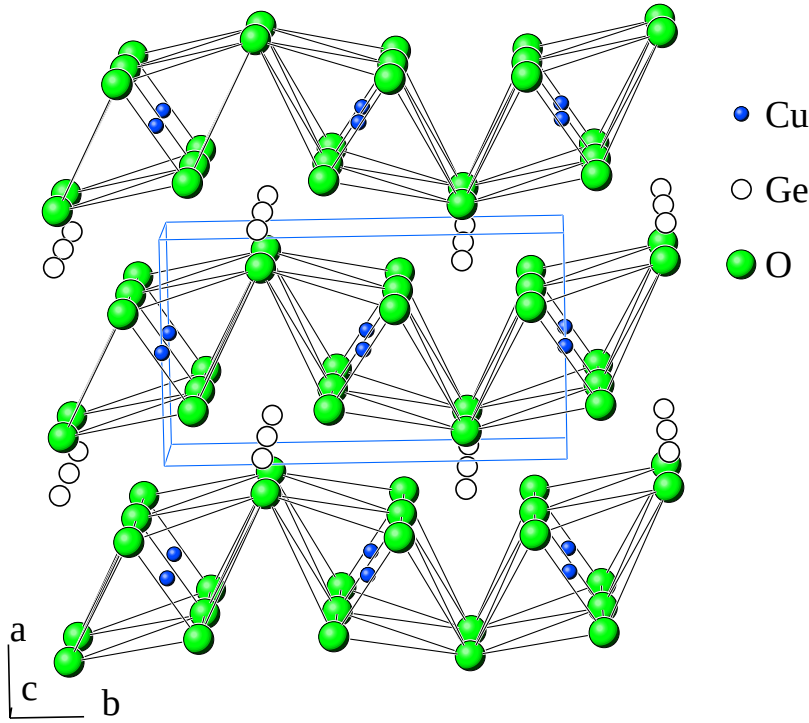
$$\boxed{\alpha_c \approx 0.241167(5)} \quad (2.5)$$

sind, liegt eine spontane Symmetriebrechung der Translationssymmetrie vor [18–20]. Dabei bindet sich im Grundzustand jedes zweite Paar benachbarter Spins zu einem Singulett. Im Fall überkritischer Frustration  $\alpha > \alpha_c$  öffnet sich in der Dispersionsrelation eine Lücke und die angeregten Zustände haben auch für verschwindenden Impuls eine endliche Energie:  $\omega(0) > 0$ . Die Spinlücke  $\Delta$  (vgl. Abbildung 8) rührt von der Mindestenergie her, die zum Aufbrechen eines Singuletts benötigt wird. Somit hängt es von der Reichweite der in der Überlagerung auftretenden Singuletts ab, ob die elementaren Anregungen massiv (endliche Reichweite) oder masselos (beliebig große Reichweite) sind.

Der Wert für die kritische Frustration wird in Kapitel 4 zur Festlegung der Phasengrenzlinie zwischen einer lückenlosen ( $\alpha \leq \alpha_c$ ) und einer lückenbehafteten ( $\alpha > \alpha_c$ ) Phase benutzt werden.

## 2.2 Allgemeines zu $\text{CuGeO}_3$

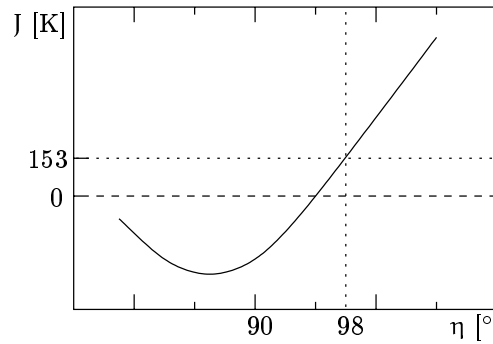
Die Entdeckung der ersten anorganischen Spin-Peierls-Substanz Kupfergermanat ( $\text{CuGeO}_3$ ) durch *Hase et al.* [1] war ein großer Fortschritt in der Erforschung des Phänomens des Spin-Peierls-Phasenübergangs [22]. Das relativ einfach aufgebaute anorganische  $\text{CuGeO}_3$  erlaubte im Gegensatz zu den bis dahin bekannten organischen Spin-Peierls-Substanzen wie  $(\text{TTF})(\text{CuBDT})$  oder  $\text{MEM}(\text{TCNQ})_2$  (Übersicht in Referenz [22]) die Herstellung guter und großer Einkristalle und war somit experimentellen Methoden wesentlich leichter zugänglich (Übersicht in Referenz [23]). Abbildung 3 zeigt die Kristallstruktur von  $\text{CuGeO}_3$  [21, 24]. Zwischen in  $a$ -Richtung benachbarten  $\text{CuO}_6$ -Oktaedern, die auch in Hochtemperatursupraleitern gefunden werden, liegen  $\text{GeO}_4$ -Tetraeder. Da die  $\text{CuO}_6$ -Oktaeder in  $b$ -Richtung alternierend gegeneinander verkippt sind, besteht die Einheitszelle aus zwei Formeleinheiten  $\text{CuGeO}_3$ . Im Zentrum der Kupfer-Sauerstoff-Oktaeder sitzen entlang der  $c$ -Achse die  $\text{Cu}^{2+}$ -Ionen. Auf den beiden Spitzen des stark verzerrten Oktaeders befinden sich die üblicherweise mit O1 bezeichneten Sauerstoffatome. Die restlichen vier Sauerstoffatome O2 haben einen um etwa 30% kleineren Abstand zu dem Kupferion. Da je zwei benachbarte Oktaeder zwei der O2-Atome miteinander teilen, kommt es zu einer Cu-O2-Cu-Brücke, deren Bindungswinkel  $\eta$  etwa  $98^\circ$  beträgt. Die dominierende magnetische Wechselwirkung zwischen den einen Spin  $S = 1/2$  tragenden Cu-Ionen der in  $c$ -



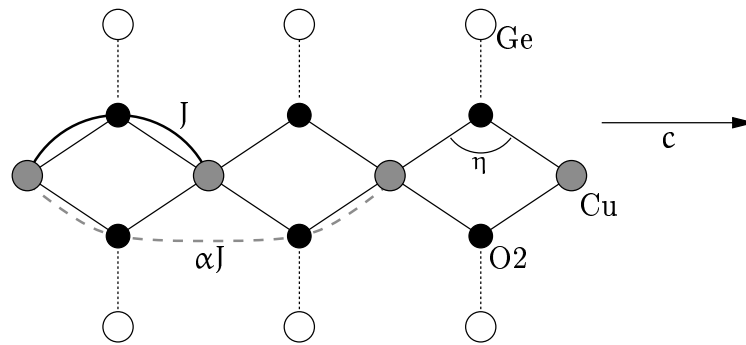
**Abbildung 3:** Kristallstruktur von  $\text{CuGeO}_3$  [21]. Der Quader markiert die Einheitszelle.

Richtung orientierten Ketten ist eine Superaustausch-Wechselwirkung über die Sauerstoff-Brücken der gemeinsamen Kanten. Obwohl der  $\text{Cu-O}_2\text{-Cu}$ -Winkel nahe bei  $90^\circ$  liegt und so nach den Goodenough-Kanamori-Anderson-Regeln ein schwach ferromagnetischer Austausch zu erwarten ist, findet man eine antiferromagnetische Kopplung  $J \approx 150 - 160 \text{ K}$ . Ursache hierfür sind einerseits die Abweichung vom  $90^\circ$ -Winkel bei der Kation-Ligand-Kation-Brücke [24], andererseits der Einfluss der Ge-Seitengruppe auf die p-Orbitale der Sauerstoffe [25]. Die Aufhebung der Orthogonalität der p-Orbitale erlaubt Hüpfprozesse, die im reinen GKA-Fall aus Symmetriegründen nicht erlaubt sind oder sich wegheben. Insgesamt erhält man so eine schwache effektive antiferromagnetische Kopplung. In Abbildung 4 erkennt man, dass aufgrund der Nähe zur Nullstelle von  $J(\eta)$  die relative Änderung der Kopplungskonstanten  $\Delta J/J$  unter Variation des Winkels  $\eta$  bei  $\text{CuGeO}_3$  sehr groß ist. Es ist daher für eine adäquate Beschreibung von  $\text{CuGeO}_3$  wichtig, Gitterschwingungen miteinzubeziehen, insofern sie die Bindungswinkel verändern.

Die magnetischen Wechselwirkungen zwischen benachbarten Spins der-



**Abbildung 4:** Austauschkopplung  $J$  als Funktion vom Cu-O2-Cu-Winkel  $\eta$  [24]. Die Asymmetrie von  $J(\eta)$  bezüglich  $90^\circ$  ist ein Seitengruppeneffekt. Der Einfluss der Ge-Atome zerstört die Orthogonalität der p-Orbitale auf den O2-Liganden und damit die Äquivalenz der entsprechenden Austauschpfade.

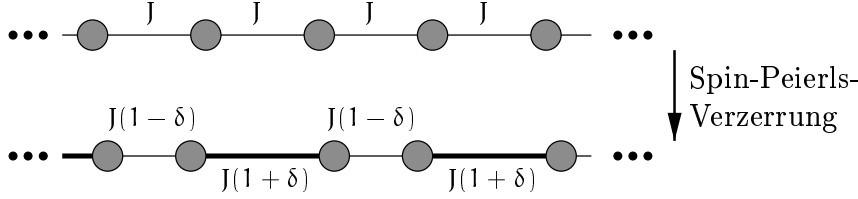


**Abbildung 5:** Superaustausch in  $\text{CuGeO}_3$  über ein (Cu-O-Cu-Pfad) bzw. zwei (Cu-O-O-Cu-Pfad) Sauerstoff-Ionen. Die Kupferketten liegen in  $c$ -Richtung und die Sauerstoff-Liganden O2 in der Basalebene der  $\text{CuO}_6$ -Oktaeder. Der Bindungswinkel  $\eta$  beträgt ungefähr  $98^\circ$ .

selben Kette dominieren die Kopplungen zwischen den Ketten. Cu-O2-O2-Cu-Austauschpfade führen allerdings zu zusätzlichen Übernächstnachbar-Kopplungen, die die magnetische Wechselwirkung zwischen den Cu-Spins frustrieren [26]. In Abbildung 5 sind die Superaustausch-Wechselwirkungen über ein bzw. zwei Sauerstoffatome veranschaulicht.

### 2.3 Spin-Phonon-Kopplung und Spin-Peierls-Übergang

Der Spin-Peierls-Übergang ist ein dreidimensionaler struktureller Phasenübergang, dessen Ursache die Instabilität des eindimensionalen Antiferro-



**Abbildung 6:** Dimerisierung eines Spin-Peierls-Systems. Die statische Gitterverzerrung hat eine alternierende Austauschkopplung zur Folge. Das Auftreten der starken Kopplungen  $J(1 + \delta)$  auf den langen Bonds ist eine Eigenart des  $\text{CuGeO}_3$  (siehe Text).

magneten gegenüber einer Dimerisierung ist. Unter Dimerisierung versteht man eine alternierende statische Verzerrung, wie sie in Abbildung 6 dargestellt ist. Die magnetoelastische Kopplung treibt das System unterhalb einer Übergangstemperatur  $T_{\text{SP}}$  in eine verzerrte Phase.

Beim  $\text{CuGeO}_3$  bewegen sich von den O2-Atomen der Basalebene der  $\text{CuO}_6$ -Oktaeder je zwei aufeinander zu (O2a) bzw. voneinander weg (O2b). Der alternierenden Vergrößerung und Verkleinerung der Abstände zwischen den  $\text{Cu}^{2+}$ -Ionen entspricht eine dementsprechende Änderung des Cu-O2-Cu-Bindungswinkels. Da eine Verkleinerung dieses Winkels eine Verkleinerung der Austauschkopplung zur Folge hat, treten zwischen näher zusammengerückten  $\text{Cu}^{2+}$ -Ionen schwache Bonds auf. Dagegen bedingt eine Winkelvergrößerung eine Stärkung der antiferromagnetischen Kopplungsanteile und führt damit zu starken Bonds zwischen weiter voneinander entfernten Plätzen (vgl. Abbildung 4).

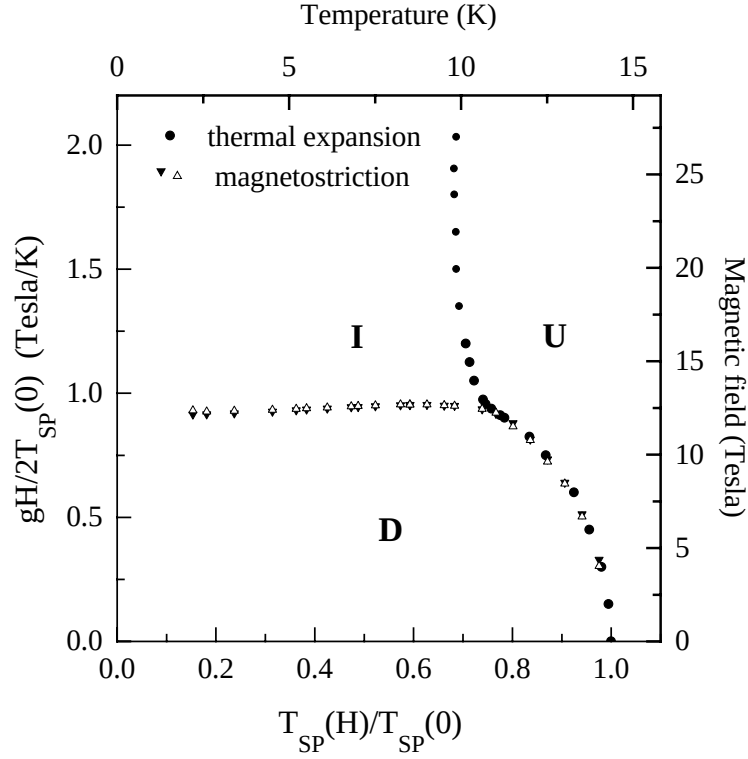
Um Änderungen der Spin-Spin-Kopplungen aufgrund von kleinen Auslenkungen, d. h. für niedrige Phononenenergien, beschreiben zu können, ist es ausreichend, die Phononen selbst in harmonischer Näherung und die Ankopplung an das Spinsystem als linear in den Auslenkungen zu betrachten. Der Hamiltonoperator der frustrierten Heisenbergkette (2.4) kann dann unter Einbeziehung der hier als dispersionslos angenommenen Phononen als

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_{\text{SB}} + \mathcal{H}_B \quad (2.6)$$

$$\mathcal{H}_S = \sum_i J(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) \quad (2.7)$$

$$\mathcal{H}_B = \sum_i \omega b_i^\dagger b_i \quad (2.8)$$

$$\mathcal{H}_{\text{SB}} = \sum_i (\mathcal{A}_i b_i^\dagger + \mathcal{A}_i^\dagger b_i) \quad (2.9)$$



**Abbildung 7:** Phasendiagramm von  $\text{CuGeO}_3$  [21]. U: homogene Phase (*uniform*), D: dimerisierte Phase und I: inkommensurabel modulierte Phase.

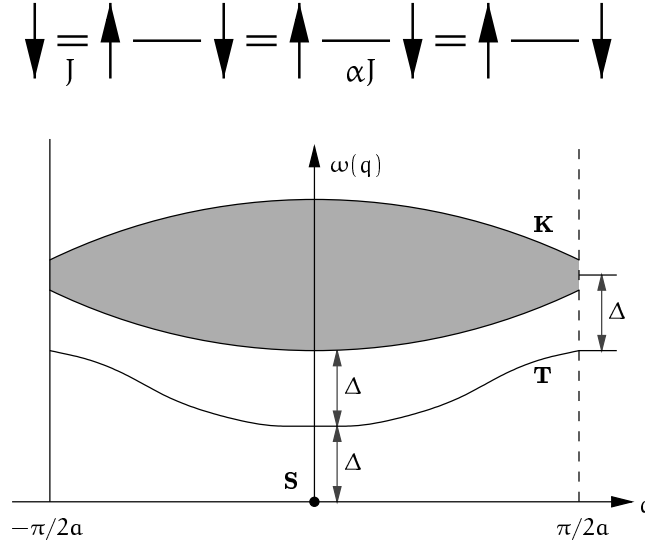
geschrieben werden. Dabei ist im Ankopplungsoperator

$$\mathcal{A}_i = g(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i-1}) \quad (2.10)$$

eine Konstante  $g$  enthalten, die das Maß für die Kopplungsstärke zwischen phononischem und magnetischem Teilsystem ist. Die direkte Wechselwirkung zwischen den Spins auf den Plätzen  $i$  und  $i+1$  bzw.  $i-1$  wird moduliert durch die Phononverrückung  $b_i^\dagger + b_i$ . Der Vorteil einer solchen Differenzkopplung (2.10) liegt darin, dass der Term in der unverzerrten Phase keinen Beitrag liefert [2]. Wie eine so genannte lokale Kopplung, die auch im Zusammenhang mit  $\text{CuGeO}_3$  benutzt wird, berücksichtigt werden kann, wird in Kapitel 4.4.3 erläutert.

Um entscheiden zu können, ob das oben beschriebene Verzerrungsmuster eingenommen wird, muss die Bilanz zwischen Anhebung der elastischen und Absenkung der magnetischen Energie betrachtet werden. Die Absenkung der magnetischen Energie ist in der dimerisierten Phase besonders stark, da es zur Bildung von Singulettpaaren auf den starken Bonds kommt. Gibt





**Abbildung 8:** Spin-Peierls-Instabilität. S: Singulett-Grundzustand, T: angeregter Triplett-Zustand und K: Kontinuum (schraffiert). Die angeregten Zustände sind in der dimerisierten Phase durch eine Energielücke  $\Delta$  vom Grundzustand getrennt.

$\delta \in [0, 1)$  die Größe der Verzerrung an und bezeichnet  $K_0$  die Federkonstante, dann ergibt sich der Hamiltonoperator in der dimerisierten Phase in adiabatischer Näherung zu

$$\mathcal{H} = J \sum_i \left[ \left( 1 + (-1)^i \delta \right) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \alpha \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} + \frac{K_0}{2} \delta^2 \right]. \quad (2.11)$$

Es kann gezeigt werden, dass der Energiegewinn im unfrustrierten Fall proportional zu  $\delta^{4/3}$  ist [27]. Der Verlust in der elastischen Energie ist dagegen proportional zu  $\delta^2$  und wird damit überkompensiert. Da für überkritische Frustration  $\alpha > \alpha_c$  das Spinsystem bereits *ohne* Kopplung an Phononen spontan die Translationssymmetrie bricht und einen dimerisierten Grundzustand bildet, fällt hier der Gewinn an magnetischer Energie noch höher aus. Er ist proportional zu  $\delta$ , da bereits die 1. Ordnung Störungstheorie in  $\delta$  einen nichtverschwindenden Beitrag liefert. So erklärt sich die starke Neigung der Spinkette zur Dimerisierung.

Der oben beschriebene Mechanismus ist Ursache eines Phasenübergangs zweiter Ordnung bei Unterschreiten einer kritischen Temperatur ( $T_{SP} \approx 14$  K für  $\text{CuGeO}_3$ ) von einer unverzerrten Phase (U-Phase), in der die  $\text{Cu}^{2+}$ -Ionen äquidistant entlang der c-Achse liegen, in eine dimerisierte Phase (D-Phase) mit dem Verzerrungsmuster aus Abbildung 6. Zur Veranschaulichung ist in

Abbildung 7 das vollständige experimentelle Phasendiagramm von  $\text{CuGeO}_3$  in Abhängigkeit von angelegtem Magnetfeld und Temperatur dargestellt. Da die D-Phase eine Spinlücke  $\Delta$  aufweist (vgl. Abbildung 8), die von der Mindestenergie herrührt, die zum Aufbrechen eines Singulets benötigt wird, ist sie stabil gegen nicht zu große Magnetfelder. Oberhalb eines kritischen Feldes, spätestens wenn die Zeemanenergie  $g\mu_B H$  die Energielücke übersteigt, tritt eine dritte Phase mit von Gitterplatz zu Gitterplatz variierenden Verzerrungen auf (inkommensurabel modulierte Phase).

## 2.4 Nichtadiabatische Beschreibung von $\text{CuGeO}_3$

Der übliche Zugang für die anorganischen Spin-Peierls-Substanzen ist der von *Cross und Fisher* [27]. Hier wird die Ankopplung des Spinsystems an die phononischen Freiheitsgrade in Molekularfeldnäherung und *Random Phase Approximation* beschrieben. Als Voraussetzung für die Gültigkeit dieses Zugangs müssen die Energien der Peierls-aktiven Phononmoden klein sein im Vergleich zur magnetischen Austauschenergie. Ein solches *pre-existing soft phonon* gibt es beim  $\text{CuGeO}_3$  nicht, wie man in Tabelle 1 ablesen kann. Selbst die Energie des  $\omega_0^{(1)}$ -Phonons liegt mit ca. 150 K in derselben Größenordnung wie die magnetische Austauschkopplung. Ebenso ist beim  $\text{CuGeO}_3$  kein zusätzliches „Weichwerden“ der Peierls-aktiven Phononmoden zu beobachten, wie man es bei den organischen SP-Substanzen findet und wie es von den meisten RPA-Rechnungen vorhergesagt wird. Bei  $\text{CuGeO}_3$  ist im Gegenteil sogar ein *phonon hardening* (d. h. ein Anwachsen der Phononfrequenzen) um ca. 5% bis 6% mit abnehmender Temperatur zu beobachten [28]. Eigentlich müssten zu einer *adiabatischen* Beschreibung der Phononen deren Energien sogar unterhalb der Energieskala des Spinsystems liegen, d. h. es muss auch  $\omega_0 < \Delta$  gelten [29, 30].

Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass *Gros und Werner* mit der bereits von *Cross und Fisher* angewandten Theorie (d. h. RPA für die Spin-Phonon-Kopplung und Bosonisierung für die Spin-Dynamik) in bestimmten Parameterbereichen ein „Hartwerden“ von Peierls-aktiven Phonon-Moden vorhersagen können [31].

Für die organometallische Substanz  $(\text{TTF})\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$  ist eine adiabatische Beschreibung nach den Daten aus Tabelle 1 gut begründet. Die schnellen Spinfreiheitsgrade passen sich den langsamen Phononen an und das (niederenergetische) Phononsubsystem wird durch die (höherenergetischen) magnetischen Freiheitsgrade renormiert. Resultat ist ein effektives Phononmodell.

Da die adiabatische Beschreibung für das  $\text{CuGeO}_3$  nicht angemessen ist,

|                                  | $(\text{TTF})\text{CuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$ | $\text{CuGeO}_3$                                                                                                                                                                  |
|----------------------------------|-----------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Sprungtemperatur                 | $T_{\text{SP}} \approx 12 \text{ K}$                | $T_{\text{SP}} \approx 14.2 - 14.4 \text{ K}$<br>[32]                                                                                                                             |
| Energielücke                     | $\Delta \approx 20 \text{ K}$                       | $\Delta \approx 23 \text{ K}$                                                                                                                                                     |
| Magnetische<br>Austauschkopplung | $J \approx 68 \text{ K}$                            | $J \approx 150 - 160 \text{ K}$<br>[24, 33, 34]                                                                                                                                   |
| Phononenergien                   | $\omega_0 \approx 10 \text{ K}$                     | $\omega_0^{(1)} \approx 150 \text{ K}$<br>$\omega_0^{(2)} \approx 313 \text{ K}$<br>$\omega_0^{(3)} \approx 533 \text{ K}$<br>$\omega_0^{(4)} \approx 1181 \text{ K}$<br>[28, 35] |

**Tabelle 1:** Vergleich der experimentellen Daten einer organischen Spin-Peierls-Substanz und des anorganischen  $\text{CuGeO}_3$

das Verhalten eines physikalischen Systems aber von den niederenergetischen Freiheitsgraden bestimmt wird, liegt es nahe einen *nichtadiabatischen* Zugang zu wählen, wie es *Uhrig* in Referenz [2] vorgeschlagen hat. Man betrachtet also für  $\text{CuGeO}_3$  das Phononsubsystem als schnell, das Spinsubsystem als langsam, sodass die phononischen Freiheitsgrade die magnetischen renormieren, und gelangt so zu einem effektiven Spinmodell.

Ein solches effektives Spinmodell für die frustrierte Heisenbergkette mit Spin-Phonon-Kopplung wird in dieser Arbeit hergeleitet. Die Methode der Flussgleichungen, die dabei zur Anwendung kommt, soll im nächsten Kapitel vorgestellt werden.



### 3 Flussgleichungsmethode

Zur Behandlung des Problems der Spin-Phonon-Kopplung wird der von Wegner [3] eingeführte Zugang über Flussgleichungen verwendet, in dem ähnlich einer Fröhlichtransformation [36] die direkte Wechselwirkung des Spinsystems mit den Phononen „weggedreht“ wird, um so einen effektiven, möglichst lokalen Hamiltonoperator zu erhalten. In diesem Abschnitt werden die Methode der Flussgleichungen sowie einige Anwendungsmöglichkeiten vorgestellt.

#### 3.1 Grundlagen der Flussgleichungen

Eines der grundlegenden Probleme bei der Behandlung quantenmechanischer Vielteilchenprobleme ist die Diagonalisierung des Hamiltonoperators, um so über die Eigenzustände und die zugehörigen Energien Erwartungswerte relevanter Observablen zu berechnen. Im Allgemeinen wird eine solche Diagonalisierung z. B. aufgrund der hohen Dimension des Hilbertraums nicht durchführbar sein – mit Ausnahme der wenigen exakt lösbaren Modelle – und man wird versuchen, das Problem in eine einfachere Gestalt zu überführen. Dazu wird in herkömmlichen Methoden der Hamiltonoperator  $\mathcal{H}$  einer endlichen Zahl von hintereinander angewendeten unitären Transformationen unterzogen:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2 \rightarrow \cdots \rightarrow \mathcal{H}_n = \mathcal{H}_{\text{eff}} \\ \mathcal{H}_i &= \mathcal{U}_i \mathcal{H}_{i-1} \mathcal{U}_i^\dagger \quad \text{mit } i = 1, 2, \dots, n.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Die unitären Transformationen entsprechen Basiswechseln, deren Ziel es ist, die Nichtdiagonalelemente des Hamiltonoperators beliebig klein zu machen, sodass am Ende ein Hamiltonoperator in Blockdiagonalgestalt oder im günstigsten Fall in Diagonalgestalt vorliegt. Die endgültige Darstellung von  $\mathcal{H}_n$  ist nur außerhalb der Blöcke eindeutig. Es können weitere unitäre Transformationen angewendet werden, die innerhalb eines Blockes zu anderen Matrixelementen führen. Dies ist zu beachten, wenn die über die Flussgleichungsmethode oder ein anderes auf Basistransformationen beruhendes Verfahren erhaltenen effektiven Modelle untereinander oder mit den Ergebnissen anderer Verfahren zur Gewinnung effektiver Hamiltonoperatoren verglichen werden (z. B. das Kumulantenverfahren aus Referenz [37]). Im Allgemeinen wird man nur die Erwartungswerte direkt vergleichen können, da diese unabhängig bezüglich unitärer Transformationen sind.

Nach Anwendung einer Folge vereinfachender unitärer Transformationen

lässt sich der effektive Operator  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  als

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{U} \mathcal{H} \mathcal{U}^\dagger \quad \text{mit} \quad \mathcal{U} := \prod_{i=1}^n \mathcal{U}_i \quad (3.2)$$

schreiben. Aufgrund der Unitarität der  $\mathcal{U}_i$  (und damit von  $\mathcal{U}$ ) sind die Eigenwerte  $\lambda_i$  von  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  auch Eigenwerte von  $\mathcal{H}$ . Die Eigenvektoren der Matrix  $\mathcal{H}$  sind durch  $\mathcal{U}^\dagger v_i$  gegeben, wobei  $v_i$  die Eigenvektoren von  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  sind. Der Vorteil liegt nun darin, dass Eigenwerte und -vektoren der Matrix in Diagonal-/Blockgestalt einfacher zu bestimmen sind.

Die von Wegner 1994 [3] vorgeschlagene Erweiterung dieses Schemas besteht nun darin, das sukzessive Anwenden unitärer Transformationen auf die hermitesche Ausgangsmatrix  $\mathcal{H}$  durch eine kontinuierlich durchgeführte Transformation zu ersetzen. Die Transformation im Rahmen dieses *Flussgleichungsformalismus* besteht aus unendlich vielen infinitesimalen Transformationsschritten. Dazu fasst man den Hamiltonoperator  $\mathcal{H}$  als Funktion eines reellen Flussparameters  $\ell$  (der Dimension  $\text{Energie}^{-2}$ ) auf:

$$\boxed{\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}(\ell) \quad \text{mit} \quad \ell \in [0 \dots \infty]} \quad (3.3)$$

$\mathcal{H}_{\ell=0}$  entspricht dem Ausgangsoperator  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{H}_{\ell \rightarrow \infty}$  wird den vereinfachten Hamiltonoperator  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  darstellen. Die kontinuierliche Transformation wird mit  $\mathcal{U}(\ell)$  bezeichnet.

Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass der Flussgleichungsformalismus – obwohl in Referenz [3] als *Flow-equations for Hamiltonians* eingeführt – nicht auf die Transformation von Hamiltonoperatoren beschränkt ist. Interessiert man sich für eine bestimmte Observable  $\mathcal{O}$ , so ist es sogar notwendig, auch diese zu transformieren. Möchte man z. B. eine bestimmte zeitabhängige Korrelationsfunktion mit  $\mathcal{O}(t)$  bezüglich  $\mathcal{H}$  auswerten – das entspricht der Berechnung von  $\langle \mathcal{O}(t) \mathcal{O}(0) \rangle_{\mathcal{H}}$  – muss jetzt unter der Transformation  $\mathcal{U}(\ell)$   $\mathcal{O}_{\ell \rightarrow \infty}(t)$  bezüglich  $\mathcal{H}_{\ell \rightarrow \infty}$

$$\langle \mathcal{O}_{\ell \rightarrow \infty}(t) \mathcal{O}_{\ell \rightarrow \infty}(0) \rangle_{\mathcal{H}_{\ell \rightarrow \infty}} \quad (3.4)$$

betrachtet werden. Hierbei ist natürlich darauf zu achten, dass  $\mathcal{O}$  und  $\mathcal{H}$  derselben Transformation  $\mathcal{U}(\ell)$  unterzogen werden. Der Fluss der Observablen (d. h. ihre  $\ell$ -Abhängigkeit) ist bei der Berechnung von Korrelationsfunktionen im Allgemeinen *nicht* mehr vernachlässigbar (z. B. [38, 39]). In Referenz [40] wenden Ragwitz und Wegner bei der Behandlung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung die Transformation auch auf bosonische Erzeuger und Vernichter an. Die Phonon-Einteilchenoperatoren zerfallen unter dem

Fluss der unitären Transformation in elektronische Teilchen-Loch-Anregungen.

Im Folgenden wird die so genannte Flussgleichung abgeleitet und das Konvergenzverhalten des Verfahrens näher betrachtet.

In Analogie zu (3.2) gilt jetzt mit einer  $\ell$ -abhängigen unitären Transformationsmatrix  $\mathcal{U}(\ell)$

$$\mathcal{H}(\ell) = \mathcal{U}(\ell) \mathcal{H}(0) \mathcal{U}^\dagger(\ell) . \quad (3.5)$$

Ein infinitesimal kleiner Transformationsschritt [analog zu (3.1)] von  $\ell$  nach  $d\ell$  schreibt sich dann

$$\mathcal{H}(\ell + d\ell) = \mathcal{U}(\ell + d\ell) \mathcal{U}^\dagger(\ell) \mathcal{H}(\ell) \mathcal{U}(\ell) \mathcal{U}^\dagger(\ell + d\ell) , \quad (3.6)$$

was man leicht sieht, wenn (3.5) nach  $\mathcal{H}(0)$  aufgelöst wieder in (3.5) an der Stelle  $\ell + d\ell$  eingesetzt wird. Sei  $\eta(\ell)$  der im Allgemeinen  $\ell$ -abhängige infinitesimale antihermitesche Erzeuger von  $\mathcal{U}(\ell)$

$$\frac{d\mathcal{U}(\ell)}{d\ell} = \eta(\ell) \mathcal{U}(\ell) \quad \text{bzw.} \quad \eta(\ell) = \frac{d\mathcal{U}^\dagger(\ell)}{d\ell} \mathcal{U}(\ell) . \quad (3.7)$$

Mit der Entwicklung von  $\mathcal{U}(\ell + d\ell)$  in erster Ordnung in  $d\ell$

$$\mathcal{U}(\ell + d\ell) = \mathcal{U}(\ell) + \eta(\ell) \mathcal{U}(\ell) d\ell = [1 + \eta(\ell) d\ell] \mathcal{U}(\ell) , \quad (3.8)$$

können die Produkte aus (3.6) unter Ausnutzung der Antihermitizität von  $\eta(\ell)$  als

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\ell + d\ell) \mathcal{U}^\dagger(\ell) &= \mathbf{1} + \eta(\ell) d\ell \quad \text{sowie} \\ \mathcal{U}(\ell) \mathcal{U}^\dagger(\ell + d\ell) &= \mathbf{1} - \eta(\ell) d\ell \end{aligned} \quad (3.9)$$

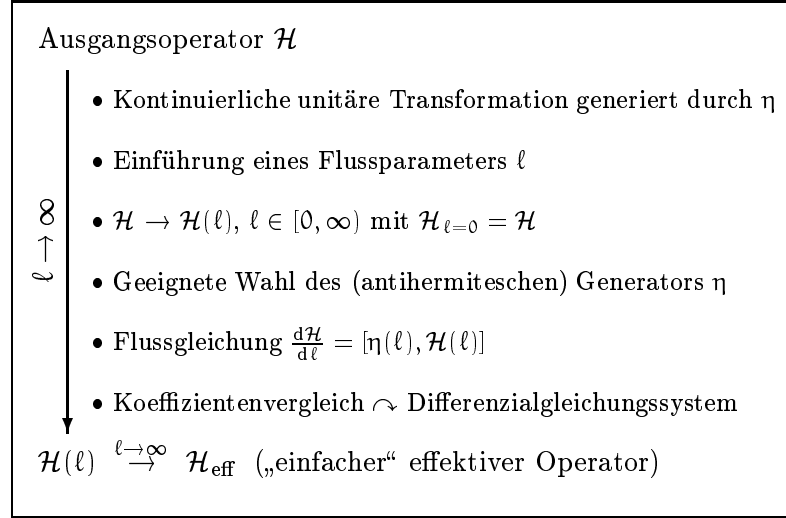
geschrieben werden und man erhält für (3.6)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\ell + d\ell) &= (\mathbf{1} + \eta(\ell) d\ell) \mathcal{H}(\ell) (\mathbf{1} - \eta(\ell) d\ell) \\ &= \mathcal{H}(\ell) + [\eta(\ell), \mathcal{H}(\ell)] d\ell + \mathcal{O}(d\ell^2) . \end{aligned} \quad (3.10)$$

Damit ist die *Flussgleichung für Hamiltonoperatoren* abgeleitet

$$\boxed{\frac{d\mathcal{H}(\ell)}{d\ell} = [\eta(\ell), \mathcal{H}(\ell)] \quad \text{mit} \quad \mathcal{H}_{\ell=0} = \mathcal{H}} . \quad (3.11)$$

Die Anfangsbedingungen der Differenzialgleichung (3.11) sind festgelegt durch die Forderung, dass der  $\ell$ -abhängige Hamiltonoperator  $\mathcal{H}(\ell)$  an der Stelle  $\ell = 0$  identisch ist mit dem ursprünglichen untransformierten  $\mathcal{H}$ . In Abbildung 3.1 wird die Flussgleichungsmethode noch einmal schematisch zusammengefasst.



**Abbildung 9:** Schema: Flussgleichungsmethode

Das Gelingen des Verfahrens hängt jetzt davon ab, einen geeigneten Generator  $\eta(\ell)$  in Abhängigkeit des Hamiltonoperators zu finden, der über die Flussgleichung (3.11) die Nichtdiagonalelemente von  $\mathcal{H}$  im Laufe der Transformation beliebig klein werden lässt. Zur Veranschaulichung mag folgendes Beispiel dienen: Sei  $\mathcal{H}(\ell)$  gegeben durch die Matrix

$$\mathcal{H}(\ell) = \begin{pmatrix} \epsilon_1(\ell) & h_{12}(\ell) & h_{13}(\ell) & & \\ h_{21}(\ell) & \epsilon_2(\ell) & h_{23}(\ell) & \cdots & \\ h_{31}(\ell) & h_{32}(\ell) & \epsilon_3(\ell) & & \\ & \vdots & & \ddots & \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

*Wegner* hat folgende Wahl des Erzeugers  $\eta(\ell)$  vorgeschlagen [3]

$$\boxed{\eta(\ell) = [\mathcal{H}_d(\ell), \mathcal{H}(\ell)]}. \quad (3.13)$$

Dabei bezeichnet  $\mathcal{H}_d(\ell)$  den Diagonaleil von  $\mathcal{H}$ .  $\eta(\ell)$  ist damit der Kommutator des „erwünschten“ mit dem „unerwünschten“ Anteil von  $\mathcal{H}$ . Verzichtet man im Weiteren auf die explizite Angabe der  $\ell$ -Abhängigkeiten und bezeichnet die Matrixelemente des Erzeugers  $\eta$  mit  $\eta_{ij}$ , so kann Gleichung (3.13) geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \eta_{ij} &= \sum_k \epsilon_i \delta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \epsilon_k \delta_{kj} \\ &= (\epsilon_i - \epsilon_j) h_{ij}. \end{aligned} \quad (3.14)$$



Für die Flussgleichung (3.11) in Komponenten folgt somit

$$\begin{aligned}\frac{\partial h_{ij}}{\partial \ell} &= \sum_k \eta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \eta_{kj} \\ &= \sum_k (\epsilon_i + \epsilon_j - 2\epsilon_k) h_{ik} h_{kj} .\end{aligned}\quad (3.15)$$

Es ist jetzt zu zeigen, dass mit dieser Generatorwahl tatsächlich ein Verschwinden der Nebendiagonalelemente einhergeht. Dazu betrachtet man das Transformationsverhalten des Quadrates der Ausgangsmatrix. Hierbei kann benutzt werden, dass die Spur von  $\mathcal{H}^2$  transformationsinvariant ist

$$\begin{aligned}\text{Sp} \mathcal{H}^2 &= \text{const.} \\ \curvearrowright \frac{\partial \text{Sp} \mathcal{H}^2}{\partial \ell} &= 0 .\end{aligned}\quad (3.16)$$

Die Auswertung der Spur liefert

$$\text{Sp} \mathcal{H}^2 = \sum_{i,j} h_{ij} h_{ji} = \sum_i \epsilon_i^2 + \sum_{i,j \neq i} h_{ij} h_{ji} , \quad (3.17)$$

was zusammen mit Gleichung (3.16)

$$\sum_i \frac{\partial \epsilon_i^2}{\partial \ell} = - \sum_{i,j \neq i} \frac{\partial}{\partial \ell} (h_{ij} h_{ji}) \quad (3.18)$$

ergibt. Dies wird mit Hilfe von Gleichung (3.15) noch einmal umgeschrieben

$$\begin{aligned}\sum_i \frac{\partial \epsilon_i^2}{\partial \ell} &= 2 \sum_i \epsilon_i \frac{\partial \epsilon_i}{\partial \ell} \\ &= 2 \sum_i \left( \epsilon_i \cdot 2 \sum_j (\epsilon_i - \epsilon_j) h_{ij} h_{ji} \right) .\end{aligned}\quad (3.19)$$

Nach Umsortieren der Doppelsumme und Einsetzen in Gleichung (3.18) erhält man schließlich

$$\sum_{i,j \neq i} \frac{\partial}{\partial \ell} |h_{ij}|^2 = -2 \sum_{i,j} (\epsilon_i - \epsilon_j)^2 |h_{ij}|^2 . \quad (3.20)$$

Der Ausgangsoperator  $\mathcal{H}(0)$  ist hermitesch. Da er im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  nur unitären Transformationen unterzogen wird, bleibt auch  $\mathcal{H}(\ell)$  hermitesch, und somit beschreibt Gleichung (3.20) die Entwicklung der positiv definiten Betragsquadrate  $|h_{ij}|^2$  unter der kontinuierlichen Transformation (3.11). Die

Summe der Betragsquadrate der Nichtdiagonalelemente von  $\mathcal{H}(\ell)$  werden also im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  solange kleiner, bis die rechte Seite in obiger Gleichung verschwindet, d. h. bis einer der beiden Faktoren verschwindet. Das bedeutet, dass keine weitere Veränderung mehr eintritt, sobald alle Nebendiagonalelemente  $h_{ij}$ , die Zustände mit ungleichen Diagonalelementen ( $\epsilon_i \neq \epsilon_j$ ) verbinden, ausgestorben sind ( $|h_{ij}|^2 = 0$ ). Im Falle von Entartung ( $\epsilon_i - \epsilon_j = 0$ ) aber kann über die Nichtdiagonalelemente keine Aussage getroffen werden und diese können erhalten bleiben.

Nach Gleichung (3.14) bestehen die Komponenten  $\eta_{ij}$  des Generators aus dem Produkt von  $(\epsilon_i - \epsilon_j)$  mit  $h_{ij}$ . Da im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  nach dem oben Gesagten einer der Faktoren verschwindet, liefern die verbleibenden Nichtdiagonalelemente  $h_{ij}$  keinen Beitrag zu  $\eta_{ij}$ , sodass insgesamt

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \eta(l) = \lim_{\ell \rightarrow \infty} [\mathcal{H}_d(\ell), \mathcal{H}(\ell)] = 0 \quad (3.21)$$

gilt. Im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  vertauscht also  $\mathcal{H}(\ell)$  mit seinem Diagonaleil  $\mathcal{H}_d$ .

Damit ist es klar, dass im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  der Ausgangsoperator in einen Operator mit Blockdiagonalgestalt überführt wird, aber eine vollständige Diagonalisierung bei dieser Generatorwahl (3.13) nicht zwangsläufig ist. Zudem ist zu erwarten, dass bei Fastentartung, d. h.  $\epsilon_i \approx \epsilon_j$ , die Konvergenz schlechter ist. Langsame Konvergenz muss hier allerdings nicht unbedingt ein Nachteil sein: Eine Untersuchung des Konvergenzverhaltens bei Beinahe-Entartung kann interessante Informationen über Resonanzen liefern. Das Auftreten solcher Divergenzen ist eine Analogie zum Auftreten von Energienennern mit  $\Delta E = 0$  in der Standard-Störungsrechnung.

Insgesamt liegt also mittels der Flussgleichung (3.11) und der Generatorwahl (3.13) eine Methode vor, den Hamiltonoperator  $\mathcal{H}$  in Blockdiagonal- und im günstigsten Fall in Diagonalgestalt zu überführen.

Bei der Wahl des Erzeugers ist man relativ frei. Die kanonische wegnersche Wahl  $\eta = [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{od}]$  ist dabei sicherlich für viele Probleme ein guter Startpunkt und dürfte in den meisten Fällen geeignet sein, eine ausreichende Vereinfachung des Hamiltonoperators herbeizuführen. Im Allgemeinen muss  $\eta$  aber an das zu lösende Problem angepasst werden. In Kapitel 3.2 wird ein solcher von der wegnerschen Wahl abweichender Generator vorgestellt.

Die Flussgleichungsmethode wurde bereits auf verschiedene Probleme der Festkörperphysik angewendet, darunter Elektron-Phonon-Kopplung [41], dissipative Quantensysteme [39], wechselwirkende Fermionen und das Hubbard-Modell [42], Spin- und Pseudospinmodelle [38, 43] sowie Störstellenprobleme [44, 45]. Eine gute Übersicht findet sich in Referenz [46].

### 3.2 Alternativer Generator

Fälle, in denen die wegnersche Wahl des Generators  $\eta$  nicht die günstigste ist, sind z. B. Hamiltonoperatoren, die bereits in einer einfachen banddiagonalen Gestalt vorliegen. Für Probleme dieser Art hat *Mielke* [47] einen modifizierten Erzeuger vorgestellt, der die Banddiagonalität erhält. Es zeigt sich, dass so auch im Falle vorhandener Entartungen eine volle Diagonalisierung erreicht werden kann und die Banddiagonalgestalt im Laufe der Transformation erhalten bleibt. Bei Benutzung des wegnerschen Generators würde die Banddiagonalität im Laufe der Transformation verloren gehen, was zu einer Erhöhung der zu berücksichtigenden Matrixelemente führt. In den Referenzen [48, 49] wird zur Behandlung dimerisierter und frustrierter  $S = 1/2$ -Ketten ein infinitesimaler Generator benutzt, der dem von *Mielke* eingeführten sehr ähnlich ist.

Definiert man den Erzeuger nicht mehr als Kommutator  $[\mathcal{H}_d, \mathcal{H}]$ , sondern führt man eine Quantenzahl  $\mathcal{Q}$  ein und setzt

$$\eta(\ell) = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}(\ell)] , \quad (3.22)$$

können die oben genannten Schwierigkeiten bei der wegnerschen Wahl vermieden werden. In den Referenzen [48, 49] wird der Hamiltonoperator in einen ungestörten Anteil und einen kleinen Störterm zerlegt, sodass  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_{\text{stör}}$  gilt. Mit der Wahl  $\mathcal{Q} = \mathcal{H}_0$  leiten *Knetter* und *Uhrig* [49] für dimerisierte und frustrierte  $S = 1/2$ -Ketten effektive Hamiltonoperatoren her, die die Anzahl der elementaren Anregungen erhalten (in dem Fall  $S = 1$ -Magnonen), d. h. es gilt  $[\mathcal{H}_{\text{eff}}, \mathcal{H}_0] = 0$ .

Es ist allerdings nicht notwendig, für  $\mathcal{Q}$  einen Anteil des Hamiltonoperators zu wählen. Für den effektiven Hamiltonoperator gilt dann analog  $[\mathcal{H}_{\text{eff}}, \mathcal{Q}] = 0$ , d. h. die Quantenzahl  $\mathcal{Q}$  ist eine Erhaltungsgröße von  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ . Dass diese Eigenschaft tatsächlich mit einer Wahl (3.22) gewährleistet werden kann, soll im Folgenden gezeigt werden. In einer Eigenzustandsbasis  $\{|\nu_i\rangle\}$  von  $\mathcal{Q}$  sollen folgende Matrixdarstellungen gelten

$$h_{ij}(\ell) := \langle \nu_i | \mathcal{H}(\ell) | \nu_j \rangle \quad (3.23)$$

$$q_{ij} := \langle \nu_i | \mathcal{Q} | \nu_j \rangle = \delta_{ij} q_i \quad \text{mit} \quad q_i := q_{ii} \quad (3.24)$$

$$\eta_{ij}(\ell) := \langle \nu_i | \eta(\ell) | \nu_j \rangle . \quad (3.25)$$

Für die Komponenten des Generators gilt dann

$$\eta_{ij}(\ell) = (q_i - q_j) h_{ij}(\ell) . \quad (3.26)$$

Den Referenzen [47–49] folgend, kann der infinitesimale Generator auch als

$$\eta_{ij}(\ell) = \text{sgn}(q_i - q_j) h_{ij}(\ell) \quad (3.27)$$

gewählt werden, sodass eine eventuell vorhandene Banddiagonalität im Laufe der kontinuierlich durchgeführten Transformation erhalten bleibt. In Kapitel 4.6 wird  $\mathcal{Q} = \sum_i b_i^\dagger b_i$  sein. Es treten nur Änderungen  $\Delta\mathcal{Q} = \pm 1, 0$  der Phononenzahl auf, sodass in diesem Fall die Generatoren (3.26) und (3.27) äquivalent sind. Einsetzen von (3.26) in die Flussgleichung (3.11) liefert

$$\begin{aligned} \frac{dh_{ij}}{d\ell} = & - (q_i - q_j)(h_{ii} - h_{jj}) \\ & + \sum_{k \neq i, j} \{ (q_i - q_k) + (q_j - q_k) \} |h_{ik}|^2 . \end{aligned} \quad (3.28)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können die Eigenzustände  $|v_i\rangle$  so angeordnet werden, dass  $q_k \geq q_i$  für  $k > i$  gilt. Für die Summe der ersten  $r$  Diagonalelemente von  $\mathcal{H}(\ell)$  gilt dann

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \sum_{i=1}^r h_{ii} = 2 \sum_{i=1}^r \sum_{k>r} (q_i - q_k) |h_{ik}|^2 . \quad (3.29)$$

Die rechte Seite von Gleichung (3.29) ist kleiner oder gleich Null. Daher ist die Summe auf der linken Seite eine Funktion, die mit wachsendem  $\ell$  monoton und stetig abfällt. Besitzt nun  $\mathcal{H}$  ein von unten beschränktes Spektrum, ist auch  $\sum_{i=1}^r h_{ii}$  von unten beschränkt. Daher konvergiert die Summe  $\sum_{i=1}^r h_{ii}$  und ihre Ableitung verschwindet für  $\ell \rightarrow \infty$ . Die Annahme eines von unten beschränkten Spektrums ist in praktischen Anwendungen keine echte Einschränkung, da physikalische Hamiltonoperatoren immer von unten beschränkt sind.

Das Verschwinden der Ableitung von  $\sum_{i=1}^r h_{ii}$  für beliebiges  $r$  impliziert schließlich

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} (q_i - q_k) |h_{ik}|^2 = 0 . \quad (3.30)$$

Aus dieser Gleichung folgt, dass *entweder* eine Entartung der Eigenzustände  $|v_i\rangle$  und  $|v_k\rangle$  vorliegt, d. h. sie gehören zum gleichen Block, *oder* es gilt  $h_{ik}(\ell = \infty) = 0$ , d. h. Matrixelemente, die verschiedene Blöcke verbinden, verschwinden. Damit ist also eine Blockdiagonalisierung von  $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\ell=\infty}$  erreicht und  $\mathcal{Q}$  ist eine Erhaltungsgröße bezüglich  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ , d. h.

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} [\mathcal{Q}, \mathcal{H}(\ell)] = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}_{\text{eff}}] = 0 , \quad (3.31)$$

womit gezeigt ist, dass ein Generator vom Typ (3.26) das Gewünschte leistet.

Wie oben bereits erwähnt wird in Kapitel 4.6 die Phononenzahl  $\mathcal{Q} = \sum_i b_i^\dagger b_i$  als Quantenzahl eingeführt. Mittels des Generators (3.26) wird ein effektives Spinmodell für die Spin-Phonon-Kette hergeleitet.

### 3.3 Anwendung auf Modelle mit Phonon-Kopplung

In der vorliegenden Arbeit wird der Flussgleichungsformalismus mit der wegnerschen Wahl von  $\eta$  auf einen Hamiltonoperator mit einer Kopplung von Spinfreiheitsgraden an die Freiheitsgrade eines Gitters angewendet. (Lediglich in Kapitel 4.6 wird der in im letzten Abschnitt vorgestellte alternative Generator verwendet.) Dabei geht es nicht um eine vollständige Diagonalisierung, sondern um ein Wegtransformieren der direkten Wechselwirkung des Spinsystems mit den Phononen (Entkopplung). Ausgangspunkt der Betrachtungen ist ein Hamiltonoperator

$$\boxed{\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{SB}} \quad (3.32)$$

mit den drei Anteilen

$\mathcal{H}_S$ : Quantenspinsystem,

$\mathcal{H}_B$ : Phononensystem („bosonisches Bad“ als Umgebung) und

$\mathcal{H}_{SB}$ : Kopplung zwischen Spinsystem und Phononanteil.

Ergebnis ist ein effektives Modell für den reinen Spin- und den reinen Phononanteil, die im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  nicht mehr gekoppelt sind

$$\boxed{\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_{S\infty} + \mathcal{H}_{B\infty} = \mathcal{H}_S^{\text{eff}} + \mathcal{H}_B^{\text{eff}}} \quad (3.33)$$

Ziel ist also die Abbildung von  $\mathcal{H}_S$  auf einen einfachen möglichst *lokalen* Spinoperator. Motivation hierfür sind z. B. Spin-Peierls-Substanzen wie das in Kapitel 2.2 vorgestellte anorganische  $\text{CuGeO}_3$ .

Die Arbeit [43] von *Kehrein, Mielke und Neu* ist der erste Versuch der Behandlung eines Spin-Boson-Problems über Flussgleichungen. In Referenz [38] erhalten *Kehrein und Mielke* durch Wahl eines geeigneteren Generators und durch Behandlung eines in Referenz [43] vernachlässigten Terms Informationen über das Verhalten des dissipativen Quantensystems bei kurzen *und* mittleren Zeiten. Die Ergebnisse des Flussgleichungszugangs wurden erfolgreich mit Resultaten aus der *Noninteracting-blip approximation* (NIBA, [50]) verglichen.

Bemerkenswert ist auch die Behandlung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung über Flussgleichungsmethoden durch *Lenz und Wegner* [41] sowie *Ragwitz und Wegner* [40]. Um den Vorteil der mehrstufigen unitären Transformationen gegenüber der einstufigen Fröhlich-Transformation [36] zu veranschaulichen, ist es hilfreich, die von beiden Zugängen gelieferten effektiven

Cooperpaar-Wechselwirkungen  $V_{k,-k-q}$  zu vergleichen

$$V_{k,-k-q}^{\text{Fröhlich}} = +|M_q|^2 \frac{\omega_q}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 - \omega_q^2} \quad (3.34)$$

$$V_{k,-k-q}^{\text{Lenz/Wegner}} = -|M_q|^2 \frac{\omega_q}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 + \omega_q^2} . \quad (3.35)$$

Dabei ist  $\epsilon_k$  die Fermiondispersion,  $\omega_q$  die Phononenergie und  $M_q$  die Kopplungskonstante. Das Fröhlich-Resultat zeigt also eine mit einer Vorzeichenumkehr verbundene Resonanz bei  $\omega_q = |\epsilon_{k+q} - \epsilon_k|$ . Ursache hierfür ist die Tatsache, dass bei der einstufigen Transformation Matrixelemente des Nichtdiagonalanteils  $\mathcal{H}_{\text{od}}$ , die sehr unterschiedliche Energien verbinden, im selben Schritt eliminiert werden wie die Matrixelemente, die Zustände ähnlicher Energien verknüpfen. Damit ist bei der Fröhlich-Transformation eine wichtige Voraussetzung renormierender Verfahren nicht erfüllt. Es sollten nämlich im Rahmen einer systematischen Renormierung zuerst größere und dann sukzessive kleinere Anregungsenergien behandelt werden, um so zu einem physikalischen Niederenergiemodell zu gelangen. Genau diese Erweiterung liefert die Methode der Flussgleichungen. Da sich, wie aus (3.20) abgelesen werden kann, eine exponentielle Unterdrückung  $h_{k,k'} = h_{k,k'}^{(0)} \exp(-(\epsilon_k - \epsilon_{k'})^2 \ell)$  der Nebendiagonalelemente  $h_{k,k'}$  ergibt, werden – wie auch in Kapitel 3.1 erläutert – die Nichtdiagonalelemente zwischen sehr unterschiedlichen Energien stark unterdrückt, die zwischen ähnlich Energien nur schwach. Am Energienenner in Gleichung 3.35 kann man sehen, dass die renormierende Eigenschaft des Flussgleichungszugangs zu einem weniger singulären Resultat führt, das zudem im gesamten Parameterbereich eine attraktive Wechselwirkung beschreibt.

*Uhrig* [2] und *Bühler* [51] wendeten das Verfahren der kontinuierlichen unitären Transformationen auf eine frustrierte Heisenbergkette mit Spin-Phonon-Kopplung an. Die beiden Zugänge werden in der vorliegenden Arbeit erweitert und in Kapitel 4 vorgestellt.

## 4 Effektive Spinmodelle

### 4.1 Modell

Ausgangspunkt der Betrachtung ist der Hamiltonoperator der frustrierten Heisenbergkette mit einer Kopplung der Spinfreiheitsgrade an die Freiheitsgrade des Gitters. Unter Beschränkung auf den einfachsten Fall von Spin-Phonon-Kopplung, nämlich auf dispersionslose harmonische Oszillatoren mit Frequenz  $\omega$  auf jedem Gitterplatz  $i$  (Einstein-Phononen), schreibt sich der komplette Hamiltonoperator als

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\ell) &= \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_{SB} + \mathcal{H}_B \\ &= \mathcal{H}_S(J_1, J_2) + \mathcal{H}_{SB}(g) + \mathcal{H}_B^{(\omega)} + \mathcal{H}_B^{(\mu)}\end{aligned}\quad (4.1)$$

$$\mathcal{H}_S = \sum_i (J_1(\ell) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2(\ell) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) \quad (4.2)$$

$$\mathcal{H}_B^{(\omega)} = \sum_i \omega(\ell) b_i^\dagger b_i \quad (4.3)$$

$$\mathcal{H}_B^{(\mu)} = \sum_i \frac{\mu(\ell)}{2} (b_i^\dagger b_i^\dagger + \text{h.c.}) \quad (4.4)$$

$$\mathcal{H}_{SB} = \sum_i (\mathcal{A}_i(\ell) b_i^\dagger + \mathcal{A}_i^\dagger(\ell) b_i) . \quad (4.5)$$

Alle Kopplungskonstanten sowie die Phononfrequenz sind nun  $\ell$ -abhängig. Mit der Transformation des Hamiltonoperators  $\mathcal{H}$  in einen effektiven Operator  $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \mathcal{H}(\ell)$  werden die  $\ell$ -abhängigen Größen renormiert und sie nehmen ihre effektiven Werte an. Als Anfangsbedingungen werden hier

$$J_1(0) = J \quad J_2(0) = 0 \quad (4.6)$$

$$\omega(0) = 1 \quad \mu(0) = 0 \quad (4.7)$$

gewählt. Der untransformierte Hamiltonoperator enthält also im reinen Spinanteil nur eine Wechselwirkung nächster Nachbarn (NN). Der frustrierende magnetische Austausch zwischen übernächsten Nachbarn (NNN) entsteht erst im Laufe der Transformation. Die Phononfrequenz  $\omega$  wird für  $\ell = 0$  gleich 1 gesetzt, und alle Kopplungen werden in Einheiten von  $\omega(0)$  gemessen. Der nichtbosonzahlerhaltende Term  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  (s. u.) existiert im Ausgangsmodell nicht, sodass  $\mu(0) = 0$  gesetzt wird. Dabei wird  $\mu(\ell)$  (für alle  $\ell$ ) als reell angenommen. Es kann allerdings nicht ausgeschlossen werden, dass  $\mu(\ell)$  im Verlauf der Transformation einen imaginären Anteil bekommt, womit  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  als  $1/2 \sum_i (\mu(\ell) b_i^\dagger b_i^\dagger + \mu^*(\ell) b_i b_i)$  geschrieben werden müsste. Da  $\mu(\ell)$  aber (im Vergleich zu  $\omega(\ell)$ ) eher klein sein wird, stellt die Annahme  $\mu(\ell) = \mu^*(\ell)$  keine entscheidende Einschränkung dar.

$\mathcal{A}_i(\ell)$  ist der Ankopplungsoperator, der die Art der Kopplung des Phononsystems an das Spinsystem beschreibt. Der Operator  $\mathcal{A}_i(0)$  besteht typischerweise aus Nächstnachbar-Spinprodukten, da der Einfluss der Spin-Phonon-Kopplung auf die Wechselwirkung benachbarter Plätze am größten ist. In Kapitel 2.2 wurde exemplarisch die Nächstnachbar-Kopplungskonstante  $J$  in Abhängigkeit einer Winkeländerung des Austauschpfades untersucht. Es sind solche Abhängigkeiten der magnetischen Austauschwechselwirkung von der Kopplung an das Gitter, die durch die Betrachtung des Terms  $\mathcal{H}_{\text{SB}}$  in die Rechnung miteinbezogen werden. Eine geeignete Wahl für  $\mathcal{A}_i(0)$  ist

$$\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i-1}) . \quad (4.8)$$

Diese Differenzkopplung liefert in der unverzerrten Phase aufgrund der Translationsinvarianz keinen Beitrag [2], d. h.  $\langle \mathcal{A}_i(0) \rangle = 0$ . Nach Referenz [3] soll  $\mathcal{A}_i(0)$  normalgeordnet sein, d. h.  $\mathcal{A}_i(0) \rightarrow \mathcal{A}_i(0) - \langle \mathcal{A}_i(0) \rangle$ , was durch die Wahl (4.8) bereits gewährleistet ist. Die direkte Wechselwirkung zwischen den Spins auf den Plätzen  $i$  und  $i+1$  bzw.  $i-1$  wird also moduliert durch die Phononverrückung  $b_i^\dagger + b_i$ . Bei der kontinuierlichen Transformation wird sich nicht nur die Kopplungskonstante ( $g \rightarrow a_0(\ell)$ ) sondern auch die Gestalt von  $\mathcal{A}_i(\ell)$  ändern. Es gilt jetzt eine geeignete Beschränkung der Terme zu finden, die zusätzlich zu  $\mathcal{A}_i(0)$  in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  zugelassen werden. In den Kapiteln 4.4 und 4.5 werden die Flussgleichungen für zwei verschiedene Operatorunterräume aufgestellt und gelöst. Jede der zusätzlichen Kopplungen ist dann mit einer eigenen  $\ell$ -abhängigen Kopplungskonstanten versehen. Es können (im Rahmen der hier durchgeführten Rechnung) Skalarprodukte zwischen weiter voneinander entfernten Plätzen (Bezeichnungen:  $a_i(\ell)$  für den Koeffizienten und für den Operator  $\mathcal{T}_i^a$ ), Kreuzproduktterme ( $b_i(\ell)\mathcal{T}_i^b$ ) und Viererspinterme ( $c_i(\ell)\mathcal{T}_i^c$ ) auftreten. Diese zusätzlichen Terme werden zwar im Laufe der Transformation entstehen, für den Limes  $\ell \rightarrow \infty$  aber verschwinden die Kopplungen (4.5) zwischen Spin- und Phonon-System, d. h.  $\mathcal{A}_i(\ell \rightarrow \infty) = 0$ . Im Kommutator  $[\eta, \mathcal{H}]$  entstehen Beiträge, die quadratisch in den Phononoperatoren  $b_i^\dagger$  bzw.  $b_i$  und quadratisch im Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  sind. Diese Terme werden in Molekularfeldnäherung behandelt. Das von der Gitterdynamik entkoppelte effektive Spinsystem mit den effektiven Kopplungskonstanten  $J_1$  und  $J_2$  ist dann das eigentliche Resultat der Rechnung.

Auf den nichtbosonzahlerhaltenden Term  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  soll noch einmal kurz eingegangen werden. Wendet man den Flussgleichungsformalismus mit der kanonischen Wahl für den Generator  $\eta$  auf  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_{\text{SB}} + \mathcal{H}_B^{(\omega)}$  an, dann entstehen durch Bildung des Kommutators von  $\eta$  mit  $\mathcal{H}_{\text{SB}}$  Beiträge  $\propto b^\dagger b^\dagger$  bzw.  $\propto b b$ . Es gibt jetzt mehrere Möglichkeiten, wie man mit diesen Termen



verfahren kann. Günstig wäre es zum Beispiel, den Generator so abzuändern, dass Beiträge, die die Phononenzahl nicht erhalten, gar nicht erst entstehen. Eine solche Modifikation des Erzeugers wurde z. B. in Referenz [41] zur Behandlung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung vorgenommen. Das Verfahren besteht darin, den Generator um einen Term  $\eta^{(2)}$  zu ergänzen

$$\eta(\ell) := \eta^{(1)} + \eta^{(2)} = [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{od}] + \eta^{(2)} , \quad (4.9)$$

sodass Terme aus  $[\eta^{(2)}, \mathcal{H}_d]$  die unerwünschten Beiträge aus  $[\eta^{(1)}, \mathcal{H}_{SB}]$  eliminieren. Dabei muss in Kauf genommen werden, dass weitere Zusatzterme entstehen. Allerdings wiegt in dem vorliegenden Fall der Nachteil durch die zusätzlichen Terme mit komplizierten Spinanteilen schwerer als die Vereinfachung durch Elimination der relativ einfachen nichtbosonzahlerhaltenden Terme. Der Ansatz

$$\eta^{(2)} := \sum_{ij} \left( D_{ij} b_i^\dagger b_j^\dagger - D_{ij}^\dagger b_i b_j \right) \quad \text{mit} \quad [D_{ij}, b_k^{(\dagger)}] \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall_{ijk} \quad (4.10)$$

erzwingt die Wahl

$$D_{ij} = \frac{[[\mathcal{H}_S, \mathcal{A}_i], \mathcal{A}_j]}{2\omega} . \quad (4.11)$$

Geht man dann mit diesem  $\eta^{(2)}$  wieder in die Flussgleichung

$$\frac{d\mathcal{H}(\ell)}{d\ell} = [\eta(\ell), \mathcal{H}(\ell)] ,$$

so entstehen komplizierte Dreifach-Kommutatoren.

Um eine unnötige Vergrößerung der Anzahl der zu berechnenden Spin-Kommutatoren und Spinprodukte zu vermeiden, wird in dieser Arbeit auf eine Modifikation des Generators verzichtet. Eine Ausnahme bildet Kapitel 4.6, in dem der in Abschnitt 3.2 vorgestellte alternative Generator  $\eta = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$  mit der Wahl  $\mathcal{Q} = \sum_i b_i^\dagger b_i$  (Phononenanzahl) verwendet wird. Dadurch entstehen erst gar keine Terme des Typs  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$ , sodass diese in Kapitel 4.6 auch nicht Bestandteil des Hamiltonoperators sind. Bei Verwendung des kanonischen Generators dagegen werden die nichtbosonzahlerhaltenden Terme von vorneherein in den Hamiltonoperator aufgenommen und werden für  $\ell \rightarrow \infty$  Bestandteil des effektiven Phononanteils. Wegen der Renormierung des Koeffizienten  $\mu(\ell)$  muss man zwar eine Differenzialgleichung mehr betrachten. Dennoch ist die Durchführung des Flussgleichungsformalismus so insgesamt kompakter und transparenter als eine Modifikation gemäß (4.9). Zudem ist es durch dieses Vorgehen möglich, tatsächlich *alle* in  $[\eta, \mathcal{H}]$  auftretenden Terme in die Rechnung aufzunehmen. Mit dem modifizierten  $\eta$  (4.9) wären einige

Terme höherer Ordnung entstanden, die man hätte vernachlässigen müssen, insbesondere Terme mit drei Phononoperatoren. Somit scheint die wegner-sche Wahl von  $\eta$  bei dem vorliegenden Problem tatsächlich geeigneter zu sein als eine Modifikation über die Gleichungen (4.9) und (4.10).

## 4.2 Flussgleichungen

In diesem Abschnitt sollen die allgemeinen Flussgleichungen bestimmt werden, ohne eine Spezifizierung des Operatorunterraumes für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  vorzunehmen. Die Zerlegung des Hamiltonoperators in den Anteil, für den ungekoppelte effektive Modelle gefunden werden sollen, und den Anteil, der wegtransformiert werden soll, sieht folgendermaßen aus

$$\mathcal{H}_d(\ell) := \mathcal{H}_S(\ell) + \mathcal{H}_B(\ell) \quad (4.12)$$

$$\mathcal{H}_{od}(\ell) := \mathcal{H}_{SB}(\ell) . \quad (4.13)$$

Mit der oben begründeten kanonischen Wahl für den Generator

$$\eta(\ell) := [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{od}] = [\mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B, \mathcal{H}_{SB}] \quad (4.14)$$

wird jetzt der Flussgleichungsformalismus durchgezogen. Mit der Abkürzung

$$\mathcal{L}\mathcal{O} := [\mathcal{H}_S, \mathcal{O}] \quad (\text{Liouville-Operator}) \quad (4.15)$$

für die Vertauschung mit dem reinen Spinanteil des Hamiltonoperators erhält man für den Erzeuger

$$\eta(\ell) = \sum_i \left\{ \left[ (\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger \right] b_i^\dagger + \left[ (\mathcal{L} - \omega)\mathcal{A}_i^\dagger + \mu\mathcal{A}_i \right] b_i \right\} . \quad (4.16)$$

Bis auf die Phononerzeuger und -vernichter sind alle in  $\eta(\ell)$  auftretenden Terme (explizit oder über die in ihnen auftretenden Koeffizienten)  $\ell$ -abhängig, also auch der Liouville-Operator  $\mathcal{L}$  (nämlich über  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$ ). Durch Koeffizientenvergleich von  $d\mathcal{H}(\ell)/d\ell$  mit  $[\eta, \mathcal{H}]$  findet man die Flussgleichungen für alle  $\ell$ -abhängigen Größen des Hamiltonoperators  $\mathcal{H}(\ell)$ . In Anhang A.1 sind alle Anteile von  $[\eta, \mathcal{H}]$  zusammengestellt.

**Flussgleichung für  $\mathcal{A}_i(\ell)$ .** Um die Differenzialgleichungen für den Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  zu finden, müssen die in den Phonon-Operatoren linearen Terme betrachtet werden. Insgesamt erhält man

$$\frac{d\mathcal{A}_i}{d\ell} = - \left\{ \left[ (\mathcal{L} + \omega)^2 - \mu^2 \right] \mathcal{A}_i - 2\mu\mathcal{L}\mathcal{A}_i^\dagger \right\} . \quad (4.17)$$

Da die exakte Lösung einer Differenzialgleichung wie (4.17), die zudem noch mit den Flussgleichungen für  $\omega(\ell)$ ,  $\mu(\ell)$ ,  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$  gekoppelt ist, nicht möglich scheint, ist es zweckmäßig, sich in einem Ansatz für  $\mathcal{A}_i$  auf einen geeigneten Unterraum von Operatoren  $\mathcal{T}_i$  zu beschränken. Wenn bestimmte Spinprodukte immer nur gemeinsam entstehen, können diese in einem  $\mathcal{T}_i$ -Operator zusammengefasst werden. Es handelt sich um Terme, die symmetrisch bezüglich des Gitterplatzes  $i$  sind. Dabei ist es sinnvoll, die Operatoren  $\mathcal{T}_i$  so zu wählen, dass deren Anteile entweder alle hermitesch oder alle antihermitesch sind. Damit ist garantiert, dass sich das Adjungieren eines Operators  $\mathcal{T}_i^\dagger$  bei Antihermitizität in einer Vorzeichenumkehr des entsprechenden Koeffizienten ausdrücken lässt.

Hat man den Operatorunterraum fixiert, können in einem Vektor  $\mathbf{v}(\ell)$  die  $\ell$ -abhängigen Koeffizienten der Operatorausdrücke  $\mathcal{T}_i$  aus  $\mathcal{A}_i$  zusammengefasst werden. Für  $\ell = 0$  ist

$$\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i-1}) \quad \text{und} \quad \mathbf{v}(0) = [g, 0, 0, \dots]^t. \quad (4.18)$$

Zur Aufstellung der Differenzialgleichungen für die Koeffizienten (d. h. für die Komponenten von  $\mathbf{v}(\ell)$ ) benötigt man die Wirkung von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i$  und die von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i^\dagger$ . Diese werden jetzt in Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  so zusammengefasst, dass die folgende Korrespondenz gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\mathcal{A}_i &= [\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots] \cdot (\mathbf{M} \cdot \mathbf{v}) \\ \mathcal{L}\mathcal{A}_i^\dagger &= [\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots] \cdot (\mathbf{N} \cdot \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Die Skalare auf den rechten Seiten ergeben sich also, indem das Produkt der Matrix  $\mathbf{M}$  bzw.  $\mathbf{N}$  mit dem Spaltenvektor  $\mathbf{v}$  nochmal mit dem von den Operatoren  $\mathcal{T}_i$  gebildeten Zeilenvektor multipliziert wird. In der Matrix  $\mathbf{N}$  werden die zusätzlichen Vorzeichen, die bei der Adjunktion der Operatoren  $\mathcal{T}_i$ , die antihermitesch sind, eingebaut. Damit kann die Flussgleichung für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  (4.17) in eine Differenzialgleichung für den Koeffizientenvektor  $\mathbf{v}(\ell)$

$$\frac{d\mathbf{v}(\ell)}{d\ell} = -\mathbf{T}(\ell)\mathbf{v}(\ell) \quad (4.20)$$

$$\mathbf{T}(\ell) := \mathbf{M}^2(\ell) + 2\omega(\ell)\mathbf{M}(\ell) + (\omega(\ell)^2 - \mu(\ell)^2)\mathbf{1} - 2\mu(\ell)\mathbf{N}(\ell) \quad (4.21)$$

umgeschrieben werden, deren formale Lösung

$$\mathbf{v}(\ell) = \mathfrak{T} \exp \left\{ - \int_0^\ell d\ell' \mathbf{T}(\ell') \right\} \mathbf{v}(0) \quad (4.22)$$

ist, wobei  $\mathfrak{T}$  in Analogie zum Zeitordnungsoperator für den  $\ell$ -Ordnungsoperator steht. Diese Gleichung ist eine Verallgemeinerung von Gleichung (7)

aus Referenz [2]. Dort ist allerdings der reine Spin-Anteil des Hamiltonoperators und damit auch der Liouville-Operator  $\mathfrak{L}$  nicht  $\ell$ -abhängig, sodass eine formale Lösung ohne  $\ell$ -Integration angegeben werden konnte. Dieser Lösung (ebd. Gleichung (8)) entspricht hier eine Darstellung

$$\nu(\ell) = \exp \left\{ -\mathbf{T}(0) \ell \right\} \nu(0) . \quad (4.23)$$

Sie lässt sich ausnutzen, um eine geeignete Beschränkung des Operatorunterraumes für die Operatoren  $\mathcal{T}_i$  zu finden. Über die Entwicklung der Exponentialfunktion bis zur zweiten Ordnung in  $\mathfrak{L}$

$$\begin{aligned} \exp \left\{ - \left[ (\mathfrak{L} + \omega)^2 - \mu^2 - 2\mu\mathfrak{L} \right] \ell \right\} &\simeq e^{-(\omega^2 - \mu^2)\ell} \cdot \\ &\cdot \left[ 1 - 2\ell(\omega - \mu)\mathfrak{L} + \left( 2\ell^2(\omega - \mu)^2 - \ell \right) \mathfrak{L}^2 + \mathcal{O}(\mathfrak{L}^3) \right] \end{aligned} \quad (4.24)$$

erhält man eine approximative Lösung für  $\nu(\ell)$ . Zur Verdeutlichung wurden dazu in (4.24) die Liouville-Operatoren verwendet. Die Flussgleichung (4.17) für die  $\mathcal{A}_i(\ell)$  kann nun unter Benutzung der in (4.23) gemäß der Entwicklung (4.24) entstehenden Operatoren gelöst werden. Der Operatorunterraum, der unter Beschränkung auf die erste Ordnung in  $\mathfrak{L}$  entsteht, enthält die Operatoren  $\mathcal{A}_i(0)$  und  $\mathfrak{L}\mathcal{A}_i(0)$ . Die Lösung der Flussgleichungen in Ordnung  $\mathfrak{L}$  wird in Kapitel 4.4 vorgestellt. Für die Ordnung  $\mathfrak{L}^2$  müssen zusätzliche Operatoren berücksichtigt werden, die durch zweimaliges Kommutieren von  $\mathcal{H}_S$  mit  $\mathcal{A}_i(0)$  entstehen (Kapitel 4.5).

**Flussgleichungen für  $\omega(\ell)$  und  $\mu(\ell)$ .** Die Flussgleichung für  $\omega(\ell)$  kann über die Terme mit Teilchenzahloperatoren  $b_i^\dagger b_i$  in  $[\eta, \mathcal{H}]$  gewonnen werden. In den Doppelsummen aus (A.14) tragen also nur die Anteile mit  $i = j$  bei. Analog findet man die Differenzialgleichung für  $\mu(\ell)$  über die Koeffizienten der nichtbosonzahlerhaltenden Operatoren  $b_i^\dagger b_i^\dagger$ . Man erhält für die Flussgleichungen

$$\frac{d\omega}{d\ell} = \left\langle \left\langle [(\mathfrak{L} + \omega)\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_i^\dagger] + [\mathcal{A}_i, (-\mathfrak{L} + \omega)\mathcal{A}_i^\dagger] \right\rangle_i \right\rangle \quad (4.25)$$

$$\frac{d\mu}{d\ell} = 2 \left\langle \left\langle [\mathfrak{L}\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_i] \right\rangle_i \right\rangle . \quad (4.26)$$

Dazu werden die Spinanteile über die Kette gemittelt, wobei lediglich die Skalarprodukte zwischen Spins nächster (NN) und übernächster (NNN) Nachbarn berücksichtigt werden. Die mit  $i$  indizierten inneren Klammern  $\langle \cdot \rangle_i$  „zählen“ also die Skalarprodukte  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$  nächster Nachbarn ( $|i - j| = 1$ ) und die übernächster Nachbarn ( $|i - j| = 2$ ). Das Skalarprodukt selbst wird in Molekularfeldnäherung behandelt (*mean field*) und durch seinen Erwartungswert

ersetzt, was durch die äußeren nichtindizierten Klammern  $\langle \cdot \rangle$  symbolisiert wird.

Für ein NN-Spinprodukt ist bei verschwindender Frustration  $\alpha = 0$  der Erwartungswert exakt bekannt:  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle = 1/4 - \ln(2)$  [13]. Für endliche Frustration können  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  und  $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} \rangle$  über die Reihenentwicklung für die Grundzustandsenergie der frustrierten antiferromagnetischen  $S = 1/2$ -Kette aus Referenz [49] gewonnen werden. Die Grundzustandsenergie pro Platz ist

$$\frac{\langle H \rangle}{J \cdot L} = \frac{\epsilon_0}{J} = \langle NN \rangle + \alpha \langle NNN \rangle - \frac{3}{8}, \quad (4.27)$$

sodass man  $\langle NN \rangle$  und  $\langle NNN \rangle$  über

$$\langle NNN \rangle(\ell) = \frac{1}{J} \frac{d\epsilon_0(\alpha(\ell))}{d\alpha} \quad (4.28)$$

$$\langle NN \rangle(\ell) = \frac{\epsilon_0(\alpha(\ell))}{J} - \alpha(\ell) \langle NNN \rangle + \frac{3}{8} \quad (4.29)$$

erhält. Da es sich bei den Störungsrechnungen aus Referenz [49] um eine Entwicklung ausgehend von starker Dimerisierung  $\delta = 1$  handelt, werden hier – um auch den Limes  $\delta \rightarrow 0$  gut erfassen zu können – geeignete Extrapolationen für  $\epsilon_0$  und  $\langle NN \rangle$  verwendet.

**Flussgleichungen für  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$ .** Es fehlen noch die Flussgleichungen für die Kopplungskonstanten  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$ . Für diese muss der Anteil (A.14)

$$\begin{aligned} [\eta, \mathcal{H}_{SB}] = & \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i - \mu \mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j^\dagger] b_i^\dagger b_j + \text{h.c.} \right\} \\ & + \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i - \mu \mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j] b_i^\dagger b_j^\dagger + \text{h.c.} \right\} \\ & - \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i - \mu \mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \end{aligned} \quad (4.30)$$

des Kommutators  $[\eta, \mathcal{H}]$  ausgewertet werden. Dies geschieht mittels eines *mean-field*-Zugangs, indem die quadratischen Bosonterme durch ihre Erwartungswerte ersetzt werden. Dies ist im Sinne einer Entwicklung in  $g$  ein systematischer Zugang [2]. Die Fluktuationen aufgrund der Wechselwirkung, die durch die Erwartungswerte nicht berücksichtigt werden, sind von der Ordnung  $g^2$ . Da aber die Zwei-Boson-Terme nur als  $g^2$ -Beiträge auftreten, ist der Fehler durch die *mean-field*-Näherung von der Ordnung  $g^4$ . Da der reine Phononanteil des Hamiltonoperators

$$\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_B^{(\omega)} + \mathcal{H}_B^{(\mu)} = \sum_i \left\{ \omega b_i^\dagger b_i + \frac{\mu}{2} (b_i^\dagger b_i^\dagger + b_i b_i) \right\} \quad (4.31)$$

in nichtdiagonaler Form vorliegt, muss dieser zur Berechnung der Erwartungswerte  $\langle b_i^\dagger b_i \rangle$ ,  $\langle b_i^\dagger b_i^\dagger \rangle$  und  $\langle b_i b_i \rangle$  zuerst auf die diagonale Gestalt

$$\sum_i \lambda_{\text{ph}} \beta_i^\dagger \beta_i + \lambda_{\text{ph},0} \quad (4.32)$$

gebracht werden. Dazu wird eine Bogoliubov-Transformation

$$\beta_i = u_i b_i - v_i b_i^\dagger \quad \text{und} \quad \beta_i^\dagger = u_i b_i^\dagger - v_i b_i \quad \text{bzw.} \quad (4.33)$$

$$b_i = u_i \beta_i + v_i \beta_i^\dagger \quad \text{und} \quad b_i^\dagger = u_i \beta_i^\dagger + v_i \beta_i \quad (4.34)$$

durchgeführt. Fordert man von den neuen Bose-Operatoren  $\beta_i$  die üblichen Kommutatorrelationen, findet man

$$\lambda_{\text{ph}} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2} \quad \text{und} \quad \lambda_{\text{ph},0} = \frac{\omega - \lambda_{\text{ph}}}{2} \quad (4.35)$$

$$v_i = \sqrt{\frac{\omega - \lambda_{\text{ph}}}{2\lambda_{\text{ph}}}} \quad \text{und} \quad u_i = -v_i \frac{\omega + \lambda_{\text{ph}}}{\mu} . \quad (4.36)$$

Über die bekannten Erwartungswerte der  $\beta_i$  ( $k_B = 1$ )

$$\begin{aligned} \langle \beta_i^\dagger \beta_j \rangle &= \frac{\delta_{ij}}{e^{\sqrt{\omega^2 - \mu^2}/T} - 1} \\ \langle \beta_i \beta_j^\dagger \rangle &= \delta_{ij} + \langle \beta_i^\dagger \beta_j \rangle \\ \langle \beta_i^\dagger \beta_j^\dagger \rangle &= 0 = \langle \beta_i \beta_j \rangle , \end{aligned} \quad (4.37)$$

die Koeffizienten (4.36) und die Transformationsgleichung (4.34) erhält man die gesuchten Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle b_i^\dagger b_i \rangle &= \frac{1}{2\lambda_{\text{ph}}(\omega - \lambda_{\text{ph}})} \left[ \mu^2 \langle \beta_i^\dagger \beta_i \rangle + (\omega - \lambda_{\text{ph}})^2 (1 + \langle \beta_i^\dagger \beta_i \rangle) \right] \\ \langle b_i^\dagger b_i^\dagger \rangle &= -\frac{\mu}{2\lambda_{\text{ph}}} \left[ 1 + 2\langle \beta_i^\dagger \beta_i \rangle \right] = \langle b_i b_i \rangle . \end{aligned} \quad (4.38)$$

Für  $i \neq j$  verschwinden die Erwartungswerte, sodass in (4.30) die Doppelsumme zu einer einfachen Summation wird. Im Limes  $T \rightarrow 0$  gilt

$$\begin{aligned} \langle b_i^\dagger b_i \rangle(\ell) &= \frac{1}{2\lambda_{\text{ph}}} (\omega(\ell) - \lambda_{\text{ph}}(\ell)) \\ \langle b_i^\dagger b_i^\dagger \rangle(\ell) &= -\frac{\mu(\ell)}{2\lambda_{\text{ph}}(\ell)} = \langle b_i b_i \rangle(\ell) . \end{aligned} \quad (4.39)$$

Die Erwartungswerte sind also auch  $\ell$ -abhängig, da diese von  $\omega(\ell)$  und  $\mu(\ell)$  abhängen. Nach Summation über  $i$  erhält man die Differenzialgleichungen für

die Kopplungen  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$ , wobei zu  $\frac{dJ_1}{d\ell}$  die Terme mit Skalarprodukten benachbarter Spins aus

$$\begin{aligned} & \sum_i \left\{ [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \langle \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} \rangle \\ & + \sum_i \left\{ [\mathcal{L}\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_i] + \text{h.c.} \right\} \langle \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b}^\dagger \rangle \\ & - \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

beitragen. Analog erhält man die Flussgleichung  $\frac{dJ_2}{d\ell}$ , zu der die frustrierenden Übernächstnachbar-Terme  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}$  aus (4.40) beitragen.

Die Terme des Typs  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i$  (bzw.  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i^\dagger$ ), die schon Bestandteil der Differenzialgleichung für die Spin-Phonon-Kopplungen (4.17) waren, tauchen auch in den Flussgleichungen für  $\omega(\ell)$  (4.25),  $\mu(\ell)$  (4.26),  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$  (4.40) auf. Diese werden dann allerdings nochmal mit  $\mathcal{A}_i(\ell)$  kommutiert oder multipliziert. Zur Berechnung der  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i$ -Terme kann wieder die Matrix  $\mathbf{M}$  (bzw.  $\mathbf{N}$  für  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i^\dagger$ ) gemäß (4.19) benutzt werden. Diese Vorgehensweise ist naheliegend, da so der Beschränkung des Operatorunterraumes in allen Flussgleichungen gleichermaßen Rechnung getragen wird.

**Erweiterungen.** Aufgrund des kleinen Operatorraumes in Ordnung  $\mathcal{L}$  bieten sich dort noch zwei andere Varianten als die gerade beschriebene an.

1. Da der Liouville-Operator in den betreffenden Ausdrücken auf  $\mathcal{A}_i(\ell)$  und nicht auf  $\mathcal{A}_i(0)$  wirkt, entstehen auch Terme, die nicht im Ansatz für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  enthalten sind. Durch Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  werden diese bereits in diesem Zwischenschritt verworfen. Da sie bei nochmaligem Multiplizieren oder Kommutieren mit  $\mathcal{A}_i(\ell)$  allerdings sehr wohl im Endergebnis Beiträge liefern, d. h. zusätzliche NN- und NNN-Skalarprodukte, wird in einer alternativen Beschreibung die Matrix  $\mathbf{M}$  in den Flussgleichungen für  $\omega$ ,  $\mu$ ,  $J_1$  und  $J_2$  *nicht* benutzt. Die dabei entstehenden Differenzialgleichungen werden im Folgenden als *modifizierte Flussgleichungen* bezeichnet.

2. Diese Erweiterung führt auf die zweite Variante, in der die Beschränkung des Operatorraumes lediglich in der Wahl von  $\mathcal{A}_i(\ell)$  besteht, die Matrix  $\mathbf{M}$  allerdings auch in Flussgleichungen für die Spin-Phonon-Kopplungen nicht mehr benutzt wird. Der Kommutator  $[\mathcal{H}_S, \mathcal{A}_i]$  enthält nämlich in Ordnung  $\mathcal{L}$  auch Skalarprodukte, die keinen Spin am Platz  $i$  enthalten, d. h. Terme wie  $\mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i+2}$ ,  $\mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_{i+3}$  usw. Durch das Mitnehmen solcher Beiträge ändern sich das Ergebnis für  $\mathcal{L}^2 \mathcal{A}_i$  und damit letztendlich die Flussgleichungen für die

Kopplungen. Diese Methode wird als *Flussgleichungen mit vollem Spinanteil* bezeichnet.

Es sei noch einmal herausgestellt, dass die verschiedenen Systematiken, die Matrizen  $\mathbf{M}$  bzw.  $\mathbf{N}$  zu benutzen, die Beschränkung von  $\mathcal{A}_i(\ell)$  unangetastet lassen. Es geht hier nur um die Frage, ob nicht in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  auftretende Anteile als Zwischenterme (d. h. bei der Berechnung von  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i$ ) mitgenommen werden, um so im Endresultat wieder zu in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  enthaltenen Termen [in (4.17)] oder zu zusätzlichen NN- und NNN-Produkten [in (4.25) und (4.26)] zu führen.

Damit sind die allgemeinen Flussgleichungen vollständig. Zur Übersicht sind in sie Anhang A.2 zusammengestellt. Um die Flussgleichungen lösen zu können, werden in den Abschnitten 4.4 und 4.5 die oben besprochenen Beschränkungen des Operatorunterraumes in Ordnung  $\mathcal{L}$  bzw. Ordnung  $\mathcal{L}^2$  vorgenommen.

### 4.3 Implementierung

Die beim Aufstellen der Flussgleichungen für einen konkreten Operatorunterraum auftretenden Mehrfach-Kommutatoren und -Spinprodukte von Spin-1/2-Operatoren sind wegen ihrer zunehmenden Unübersichtlichkeit zweckmäßiger maschinell auszuwerten. Zum Einsatz kam das Computeralgebrasystem **Reduce**, das vor allem im Bereich der Allgemeinen Relativitätstheorie aufgrund seines ausgereiften Pakets für den Umgang mit Differenzialformen (sog. Äußeres Kalkül) eingesetzt wird. Hier wurde es benutzt, da mit **Maple** keine zufriedenstellende Behandlung nichtkommutativer Operatoren zu erreichen war. Zur Implementierung der Spin-Algebra wurden die **Reduce**-Pakete **nomcom2** und **physop** benutzt, die Erweiterungen für die Behandlung komplizierter nichtkommutierender Ausdrücke sowie neue Datentypen (u. a. Vektoroperatoren) zur Verfügung stellen. Die Basisdeklarationen für die Definition eines Vektoroperators  $S$ , der mit sich selber nicht kommutiert, sind dann

```
load_package noncom2$
load_package physop$
vecop s$
noncom s, s$
physindex x, y, z$
```

Dabei wurden die Komponentenindizes  $x$ ,  $y$  und  $z$  eingeführt. Damit bezeichnet  $s(i)$  den Spinvektor am Platz  $i$  und  $s(x,i)$  dessen  $x$ -Komponente usw. Da in **Reduce** jede nichtkommutative Variable explizit deklariert werden muss, ist so bereits gewährleistet, dass reine Zahlen mit Spinoperatoren



vertauschen. Um komplexe Summen und Produkte von Operatoren automatisch zu vereinfachen, muss das Programm die Gleichheit von Termen erkennen können. Dazu ist die Einführung einer kanonischen Ordnung notwendig. Da Spinoperatoren an verschiedenen Gitterplätzen miteinander vertauschen, bietet sich hier die Sortierung nach Platzindizes an.

```
oporder s(-4),s(-3),s(-2),s(-1),s(0),s(1),s(2),s(3),s(4)$
```

Die Liste muss je nach Reichweite der zu berücksichtigenden Wechselwirkungen ergänzt werden. Mehrfach-Produkte der Komponenten eines Spins  $1/2$  können mit

$$S^k S^l = \frac{i}{2} \epsilon_{klm} S^m + \frac{1}{4} \delta_{kl} \quad \text{mit } k, l, m \in x, y, z \quad (4.41)$$

eliminiert werden. So sind die notwendigen Produkt- und Kommutator-Regeln für die Spinalgebra

```
ProductRules:= {
    s(x,~n)*s(x,n)      => 1/4*unit,
    s(y,~n)*s(y,n)      => 1/4*unit,
    s(z,~n)*s(z,n)      => 1/4*unit,
    s(x,~n)*s(y,n)      => I/2*s(z,n),
    s(x,~n)*s(z,n)      => -I/2*s(y,n),
    s(y,~n)*s(z,n)      => I/2*s(x,n),
    s(x,~n)*s(y,n)*s(z,n) => I/8*unit}$
let ProductRules$

CommutatorRules:= {
    comm(s(~a,~n),s(~b,~m)) => 0 when n neq m,
    comm(s(~a,~n),s( a, n)) => 0,
    comm(s( x,~n),s( y, n)) => I*s(z,n),
    comm(s( y,~n),s( z, n)) => I*s(x,n),
    comm(s( z,~n),s( x, n)) => I*s(y,n)}$
let CommutatorRules$
```

Bei der Deklaration dieser Regeln kann die Summation aus Gleichung (4.41) nicht direkt eingebaut werden, da der Aufruf einer Prozedur auf der rechten Seite des Zuordnungsoperators ( $=>$ ) nicht funktioniert. Ähnliche Unzulänglichkeiten treten bei der Arbeit mit **Reduce** häufiger auf. Nach der Deklaration des Levi-Civita-Symbols

```

let { levi(~a,~b,~c) => 1 when (a=x and b=y and c=z) or
                                (a=y and b=z and c=x) or
                                (a=z and b=x and c=y),
    levi(~a,~b,~c) => -1 when (a=x and b=z and c=y) or
                                (a=y and b=x and c=z) or
                                (a=z and b=y and c=x),
    levi(~a,~b,~c) => 0 }$

```

können Prozeduren für Skalar- und Spatprodukt sowie für das Skalarprodukt zweier Kreuzprodukte eingeführt werden

```

procedure sp(n,m)$
  if (n = m) then 3/4*unit
  else for each a in {x,y,z} sum s(a,n)*s(a,m)$

procedure vp(a,n,m)$
  for each b in {x,y,z} sum for each c in {x,y,z}
    sum levi(a,b,c)*s(b,n)*s(c,m)$

procedure spat(l,n,m)$
  for each a in {x,y,z} sum
    begin scalar foo1, foo2$
      foo1:= vp(a,n,m)$
      foo2:= s(a,l)*foo1$
      return foo2$
    end$

procedure vvp(k,l,n,m)$
  for each a in {x,y,z} sum
    begin scalar foo1, foo2, foo3$
      foo1:= vp(a,k,l)$
      foo2:= vp(a,n,m)$
      foo3:= foo1*foo2$
      return foo3$
    end$

```

Die Verwendung der (scheinbar überflüssigen) Hilfsvariablen `foo` resultiert aus der Tatsache, dass **Reduce** – eventuell wegen eines durch die Zusatzpakete verursachten Konflikts – die direkte Berechnung von Produkten, in denen ein Faktor von einer Prozedur geliefert wird, verweigert.

Ein weiteres Problem besteht im Vernachlässigen von Termen höherer Ordnung *am Ende der Rechnung*. Die dazu programmierten Regeln dürfen

erst nach einer vollständigen Vereinfachung der Terme angewendet werden, da diese Regeln sonst mit denen für Kommutatoren und Produkte kollidieren. Leider scheint in den Regeln das gleichzeitige Benutzen von Platzhaltern für Komponenten- und Platzindizes für kompliziertere Ausdrücke nicht zu funktionieren.

An dieser Stelle kommt die Skriptsprache **Perl** zum Einsatz, die besonders mächtige reguläre Ausdrücke zur Verfügung stellt. Ein erstes Skript vernachlässigt alle Terme höherer Ordnung, d. h. Vierer-Spin-Terme in Ordnung  $\mathcal{L}$  und Produkte von fünf Spinoperatoren in Ordnung  $\mathcal{L}^2$ . Danach werden die Spin-Komponenten wieder zu Vektoren zusammengefasst, was aufgrund der Spinisotropie des Hamiltonoperators immer gelingt. Ein weiteres Skript kann aus den vorhandenen Produkten diejenigen identifizieren, die im Ansatz für  $A_i(\ell)$  enthalten sind und nach ihnen sortieren. Nach Summation über  $i$  kann auch nach Skalarprodukten  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n$  mit gleichem Abstand der beiden Plätze  $m$  und  $n$  sortiert werden, d. h. es kann z. B. der Vorfaktor des NN- und des NNN-Anteils ermittelt werden. Die Endergebnisse können ferner zur besseren Lesbarkeit nach  $\text{\LaTeX}$  oder zur Weiterverarbeitung in die Syntax von **Maple** konvertiert werden.

Dass eine Automatisierung dieser Schritte notwendig ist, erkennt man daran, dass die Ausgabe von **Reduce** für den kompletten zu berechnenden Spinanteil in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  ca. 300000 Zeilen lang ist. Nach Vernachlässigen von Termen höherer Ordnung und Zusammenfassen zu Vektoroperatoren sind das immerhin noch 15 Seiten.

Nachdem alle Spinanteile berechnet wurden, können die Flussgleichungen aufgestellt werden. Um das gekoppelte System nichtlinearer Differenzialgleichungen (Anzahl in Ordnung  $\mathcal{L}$ : 9,  $\mathcal{L}^2$ : 28) numerisch zu lösen, wird ein Runge-Kutta-Verfahren 5. Ordnung mit adaptiver Schrittweitenkontrolle benutzt (siehe z. B. Referenz [52]). Die Routinen wurden in der Programmiersprache **C** implementiert. Da die Integration der Differenzialgleichungen eigentlich von  $\ell = 0$  bis  $\ell = \infty$  erfolgen soll, muss eine geeignete Abbruchbedingung gefunden werden. Dazu werden die Werte der Ableitung der  $\ell$ -abhängigen Koeffizienten für aufeinanderfolgende Runge-Kutta-Schritte verglichen. Unterscheiden sie sich um weniger als  $10^{-9}$ , ist der Limes  $\ell \rightarrow \infty$  erreicht. Erfahrungsgemäß tritt in gutartigen Parameterbereichen die Konvergenz zwischen  $\ell = 8$  und  $\ell = 20$  ein. Das Laufzeitverhalten der Runge-Kutta-Routinen stellte sich als unproblematisch heraus. Selbst die Lösung der Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  mit ca. 3000 Zeilen Programmcode für die Implementierung der 28 Differenzialgleichungen gelingt innerhalb nur weniger Sekunden.

#### 4.4 Ordnung $\mathcal{L}$ ( $M_5$ )

##### 4.4.1 Vorbereitungen

Um eine Aufstellung der Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  durchzuführen, muss der Ansatz für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  aus einer Linearkombination aller Terme  $\mathcal{T}_i$  bestehen, die in  $\mathcal{A}_i(0)$  und  $\mathcal{L}\mathcal{A}_i(0)$  vorkommen. Es handelt sich dabei um die Beiträge

| Koeffizient | Spinterm                                                                                                                                              |
|-------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $a(\ell)$   | $\mathcal{T}^a = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i$                                                           |
| $b_0(\ell)$ | $\mathcal{T}_0^b = i\mathbf{S}_{i-1} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1})$                                                                    |
| $b_1(\ell)$ | $\mathcal{T}_1^b = i[\mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+2}) + \mathbf{S}_{i-2} \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i)]$  |
| $b_2(\ell)$ | $\mathcal{T}_2^b = i[\mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+3}) + \mathbf{S}_{i-3} \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i)]$  |
| $b_3(\ell)$ | $\mathcal{T}_3^b = -i[\mathbf{S}_{i-1} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) + \mathbf{S}_{i-2} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1})]$ |

wobei Terme, die symmetrisch bezüglich eines Platzes  $i$  sind, zusammengefasst wurden, da diese immer nur gemeinsam entstehen. Damit hat man

$$\mathcal{A}_i(\ell) = a(\ell)\mathcal{T}^a + \sum_{n=0}^3 b_n(\ell)\mathcal{T}_n^b \quad \text{bzw.} \quad (4.42)$$

$$\mathbf{v}(\ell) = [a(\ell), b_0(\ell), b_1(\ell), b_2(\ell), b_3(\ell)]^t$$

mit den Anfangsbedingungen für  $\ell = 0$

$$\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i) \quad \text{bzw.} \quad (4.43)$$

$$\mathbf{v}(0) = [g, 0, 0, 0, 0]^t.$$

Es fehlen noch die Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$ , die die Wirkung von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i$  bzw. von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i^\dagger$  beinhalten,

$$\mathbf{M}(\ell) = \begin{pmatrix} 0 & 1/2(J_2 - J_1) & 1/2(J_1 - J_2) & 1/2J_2 & 1/2J_2 \\ 2(J_2 - J_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 - J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

$$\mathbf{N}(\ell) = \begin{pmatrix} 0 & 1/2(J_1 - J_2) & 1/2(J_2 - J_1) & -1/2J_2 & -1/2J_2 \\ 2(J_2 - J_1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 - J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

wobei alle nichtverschwindenden Einträge  $\ell$ -abhängig sind. Der Eintrag in der  $i$ -ten Zeile und  $j$ -ten Spalte entspricht dem Vorfaktor des  $j$ -ten  $\mathcal{T}$  im

Ergebnis der Anwendung von  $\mathcal{L}$  auf das  $i$ -te  $\mathcal{T}$ . Die zusätzlichen Vorzeichen in  $\mathbf{N}$  berücksichtigen die Antihermitizität der Kreuzprodukte  $\mathcal{T}^b$ , sodass (4.20) tatsächlich die Flussgleichung für den Koeffizientenvektor  $\mathbf{v}(\ell)$  ist. Durch die  $i$ -te Komponente von  $(\mathbf{M}^2 + 2\omega\mathbf{M} + \lambda_{\text{ph}}^2 \mathbf{1} - 2\mu\mathbf{N}) \cdot \mathbf{v}$  [vgl. (4.21)] ist also die Flussgleichung für den  $i$ -ten Koeffizienten gegeben. Damit können in einfacher Weise die Differenzialgleichung für die Koeffizienten aufgestellt werden.

Der gesamte Satz an Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  ist in Anhang B.1 zusammengestellt. Die modifizierten Flussgleichungen und die Flussgleichungen mit vollem Spinanteil werden hier nicht wiedergegeben, da sie die gleiche Struktur wie die unter Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  hergeleiteten haben.

#### 4.4.2 Bisherige Arbeiten

Auch *Uhrig* [2] wendete das Verfahren der kontinuierlichen unitären Transformationen auf eine frustrierte Heisenbergkette mit Spin-Phonon-Kopplung an. Für die Differenzkopplung  $\mathcal{A}_i(\ell) = g(\ell)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1})$  und

$$\begin{aligned} g(\ell = 0) &= g & g(\ell \rightarrow \infty) &\rightarrow 0 \\ J_1 &= J \equiv \text{const.} & J_2 &\equiv 0 \\ \omega &= \omega_0 \equiv \text{const.} & \mu &\equiv 0 \end{aligned} \quad (4.46)$$

wird in der Ordnung  $\frac{g^2}{\omega^2}$  und  $\frac{g^2 J}{\omega^3}$  ein bis auf  $\mathcal{O}(\frac{g^4}{\omega^4}, \frac{g^2 J^2}{\omega^4})$  exaktes effektives Spinmodell hergeleitet. Da es sich dabei um die Terme in führender Ordnung in  $g/\omega$  und  $J/\omega$  handelt, wird zur kompakten Notation das Ergebnis dieser Rechnung in den Phasendiagrammen als „Flussgleichungen in Ordnung  $g/\omega$ ,  $J/\omega$ “ bezeichnet. Aus dem effektiven Hamiltonoperator lassen sich die effektiven Kopplungskonstanten  $J_1^{\text{eff}}$  (NN) und  $J_2^{\text{eff}}$  (NNN) ablesen

$$\begin{aligned} J_1^{\text{eff}} &= J + \frac{g^2}{\omega_0} - \frac{3g^2 J}{2\omega_0^2} + \dots \\ J_2^{\text{eff}} &= \frac{g^2}{2\omega_0} + \frac{3g^2 J}{2\omega_0^2} + \dots, \end{aligned} \quad (4.47)$$

die hier nur für  $T = 0$  angegeben sind. Für endliche Temperaturen enthalten die effektiven Kopplungen (4.47) zusätzliche Faktoren vom Typ  $\coth(\omega_0/2T)$ . In Abschnitt 2.1 wurde herausgestellt, dass die frustrierte Spinkette bei Überschreiten eines kritischen Wertes  $\alpha_c = 0.241167(5)$  für die Frustration  $\alpha \equiv J_2/J_1$  einen Phasenübergang von einer lückenlosen in eine lückenbehaftete Phase vollzieht. So können  $J_1^{\text{eff}}$  und  $J_2^{\text{eff}}$  benutzt werden, um die Paare

$(g, J)$  zu finden, die im effektiven Modell genau zu einer kritischen Frustration  $\alpha_c$  führen. Indem man  $J_2^{\text{eff}}/J_1^{\text{eff}} = \alpha_c$  nach  $g$  auflöst, findet man für die kritische Kopplung  $g_c(J)$  in zweiter Ordnung  $J/\omega$

$$\frac{g_c^2}{\omega_0} = \frac{\alpha_c J}{1/2 - \alpha_c + 3/2(1 + \alpha_c)J/\omega_0} . \quad (4.48)$$

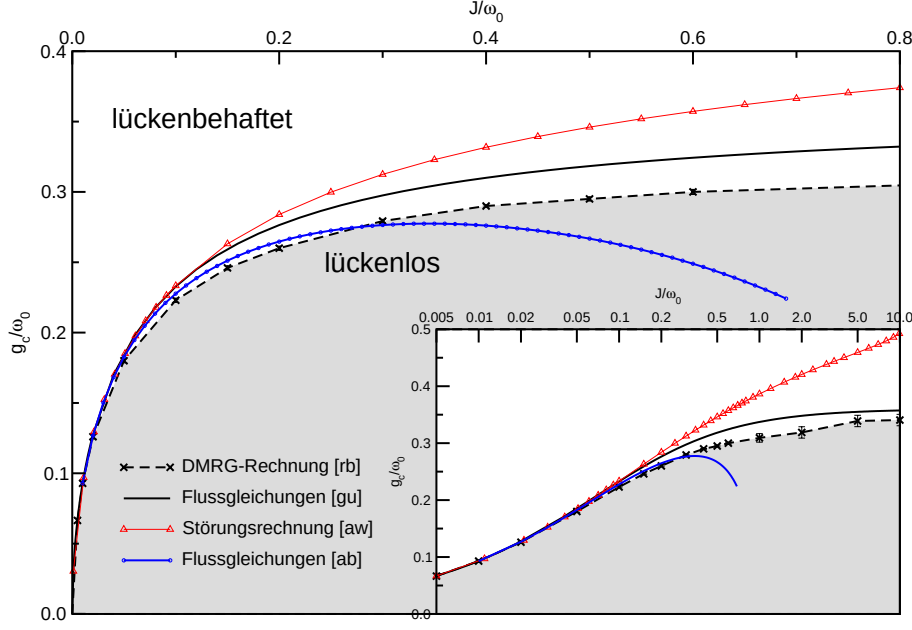
Für  $T = 0$  erhält man so ein Phasendiagramm mit der kritischen Spin-Phonon-Kopplung  $g_c$  in Abhängigkeit von der Nächstnachbar-Spinkopplung  $J$ . In Abbildung 10 sind die Ergebnisse von *Uhrig* den numerischen Rechnungen von *Bursill et al.* [53], die mittels der Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DMRG) erhalten wurden, gegenübergestellt. Die für die DMRG-Daten angegebenen Fehlergrenzen sind für  $J/\omega_0 < 1$  extrem klein ( $\Delta g_c/\omega_0 \simeq 0.002$ ), sodass diese Kurve als Referenzkurve dienen kann, um die Qualität anderer Zugänge abzuschätzen. Die beiden Kurven stimmen für  $J/\omega_0 < 0.1$  beinahe überein und zeigen auch für große  $J/\omega_0$  qualitativ gleiches Verhalten. Es ist interessant, dass Gleichung (4.48), obwohl sie nur bis zur zweiten Ordnung in  $J/\omega_0$  gültig ist, eine gute Abschätzung von  $g_c$  bis  $J/\omega_0 \simeq 1$  liefert. Generell überschätzt der Zugang von *Uhrig* aber die Größe der kritischen Kopplung.

Die Arbeit von *Bühler* [51] erweitert diesen Flussgleichungszugang um die Berücksichtigung  $\ell$ -abhängiger Kopplungen  $J_1$  und  $J_2$

$$\begin{aligned} J_1 &= J_1(\ell) & J_1(\ell = 0) &= J \\ J_2 &= J_2(\ell) & J_2(\ell = 0) &= 0 \\ \omega &= \omega_0 \equiv \text{const.} & \mu &\equiv 0 . \end{aligned} \quad (4.49)$$

Zudem wird der Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  in Ordnung  $\mathcal{L}$  betrachtet. Im Rahmen von Referenz [2] konnte die  $\ell$ -Integration noch analytisch durchgeführt werden. Die Erweiterungen machen eine numerische Lösung der Differenzialgleichungen notwendig. Der Zugang liefert im Bereich  $J/\omega_0 < 0.3$  eine Verbesserung (vgl. Abbildung 10). Für große  $J/\omega_0$  knickt die Phasengrenzlinie allerdings ab, und bei einem kritischen  $J^c$  wird die Frustration  $\alpha_c$  nicht mehr erreicht, sodass die Kurve hier abbricht.

Die Erweiterungen der beiden obigen Zugänge, die in der vorliegenden Arbeit vorgenommen werden, wurden bereits vorgestellt. Zusammenfassend handelt es sich um die Berücksichtigung der  $\ell$ -Abhängigkeit der Phononfrequenz  $\omega(\ell)$ , die Einbeziehung eines nichtbosonzahlerhaltenden Terms  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  im Hamiltonoperator ( $\rightarrow \mu(\ell)$ ), die Rechnung in den Operatorunterräumen in Ordnung  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{L}^2$ , die Aufstellung und Lösung der so genannten modifizierten Flussgleichungen und der Flussgleichungen mit vollem Spinanteil in Ordnung  $\mathcal{L}$ . Ein noch nicht erwähnter Punkt ist die Berücksichtigung länger-



**Abbildung 10:**  $T = 0$ -Phasendiagramm der antiferromagnetischen Spin-Peierls-Kette. Zusammenstellung der Resultate bisheriger Arbeiten: *Uhrig* (gu) [2], *Bursill et al.* (rb) [53], *Weiß et al.* (aw) [54] und *Bühler* (ab) [51]. Der Einsatz zeigt in halblogarithmischer Darstellung den Vergleich bis  $J/\omega_0 = 10$ .

reichweitiger Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$ . Darauf soll später eingegangen werden (Kapitel 4.4.5).

In Abbildung 10 ist eine vierte Kurve eingezeichnet. Es handelt sich um eine Rechnung von *Weiß et al.* [54], in der im antiadiabatischen Regime mittels Störungsrechnung effektive Spin-Hamiltonoperatoren<sup>1</sup> hergeleitet werden. Die Terme in der Ordnung in  $g^2/\omega_0^2$  stimmen mit denen von *Uhrig* überein. Hinzu kommen Beiträge in vierter Ordnung, sodass<sup>2</sup>

$$g_c^2 = \frac{-P + \sqrt{P^2 + 4Q\alpha_c}}{2Q} \quad (4.50)$$

$$P = \frac{\omega_0}{J} (1/2 - \alpha_c) + 3/2(1 + \alpha_c)$$

<sup>1</sup>Im hier nicht weiter interessierenden adiabatischen Bereich erhalten die Autoren ihre Ergebnisse über eine Variationsrechnung.

<sup>2</sup>In Referenz [54] wird (4.50) als  $g_c^2 = -\frac{P}{2Q} + \sqrt{\left(\frac{P}{2Q}\right)^2 + \frac{\alpha_c}{Q}}$  geschrieben [ebd. Gleichung (32)]. Der doppelte Pol führt zu einer hebbaren Definitionslücke bei  $J = 0.6098$ . Alternativ kann  $J_2^{\text{diff}}/J_1^{\text{diff}} = \alpha_c$  [Gleichungen (23,24)] nach  $g^2$  aufgelöst werden, sodass man direkt zu (4.50) gelangt.

$$Q = \frac{\omega_0}{J} \left( \frac{1}{16} + \frac{9}{8}\alpha_c \right) - \left( \frac{25}{8} + \frac{59}{24}\alpha_c \right) .$$

Die zusätzlichen Terme vierter Ordnung führen allerdings zu noch größeren Werten für  $g_c$ , sodass die Phasengrenzlinie noch deutlich über der von *Uhrig* liegt. Für  $J/\omega_0 \simeq 10.7316$  wird die Wurzel in (4.50) imaginär und die Kurve bricht ab. Dort liegt die kritische Kopplung im Bereich  $g/\omega_0 \simeq 0.5057$ . Der Verlauf der Kurve deutet eher auf ein anwachsendes Verhältnis  $g_c/\omega_0$  im Limes  $J/\omega_0 \rightarrow \infty$  hin, wie man im halblogarithmischen Inset in Abbildung 10 sehen kann. Die DMRG-Daten lassen dagegen auf einen endlichen Wert von  $g_c/\omega_0$  im Limes  $J/\omega_0 \rightarrow \infty$  schließen. Auch das Ergebnis von *Uhrig* liefert ein endliches  $g_c/\omega_0$  im Grenzwert großer Kopplungen  $J/\omega_0$

$$\lim_{J/\omega_0 \rightarrow \infty} g_c/\omega_0 = \sqrt{\frac{2\alpha_c}{3(1+2\alpha_c)}} \simeq 0.3599 . \quad (4.51)$$

#### 4.4.3 Lokale Kopplung

In dieser Arbeit werden die meisten Rechnungen mit der Differenzkopplung  $\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i-1})$  durchgeführt. Es kann aber auch physikalisch sinnvoll sein, eine lokale Kopplung

$$\mathcal{H}_{\text{SB}}^{\text{loc}} = g \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} (b_i^\dagger + b_i) \quad (4.52)$$

zu betrachten, wie es z.B. in der bereits im letzten Abschnitt erwähnten Referenz [54] getan wurde.

Beide Kopplungstypen unterscheiden sich im Mechanismus, wie das Gitter das Austauschintegral  $J$  beeinflusst. Für die lokale Kopplung (4.52) kann man sich einzelne harmonische Freiheitsgrade vorstellen, die direkt die magnetische Wechselwirkung zwischen zwei Cu-Atomen beeinflussen. Im Zusammenhang mit  $\text{CuGeO}_3$  korrespondiert das mit Seitengruppeneffekten durch die Germanium-Atome [25, 26, 35]. Im Falle der Differenzkopplung (4.8) hängt die Austauschwechselwirkung direkt von der Position eines Cu-Atoms zwischen den beiden benachbarten ab. Das entspricht bei  $\text{CuGeO}_3$  Änderungen zweier benachbarter Cu – O – Cu-Bindungswinkel, die in Kapitel 2.2 diskutiert wurden. Dabei wird einer auf Kosten des anderen vergrößert (bzw. verkleinert).



*Weiß* *et al.* erhalten für die kritische Kopplung  $g_c(J)$  bei lokaler Kopplung<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} g_c^2 &= \frac{P + \sqrt{P^2 + 4Q\alpha_c}}{2Q} \\ P &= \frac{\omega_0}{J} \frac{\alpha_c}{2} - \frac{3}{2}(1 + \alpha_c) \\ Q &= \frac{\omega_0}{J} \frac{3}{8} \left( \frac{1}{2} + \alpha_c \right) - \left( \frac{37}{96} + \frac{7}{24}\alpha_c \right). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Die Kurve ist in Abbildung (11) aufgetragen. Im Limes  $J/\omega_0 \rightarrow 0$  erreicht  $g_c/\omega_0$  im Unterschied zur Differenzkopplung einen endlichen Wert

$$\lim_{J/\omega_0 \rightarrow 0} g_c/\omega_0 = \sqrt{\frac{8\alpha_c}{3(1 + 2\alpha_c)}} \simeq 0.6587. \quad (4.54)$$

Für  $J/\omega_0 \simeq 2.2887$  wird die Wurzel in (4.53) imaginär und die Kurve bricht ab. Wie schon bei dem Ergebnis für die Differenzkopplung, das im vorherigen Kapitel vorgestellt wurde, deutet der Verlauf der Kurve auf ein anwachsendes Verhältnis  $g_c/\omega_0$  im Limes  $J/\omega_0 \rightarrow \infty$  hin, wie man in Abbildung 11 sehen kann.

*Weiß* *et al.* weisen auf die Bedeutung der Beiträge in vierter Ordnung für die Berechnung effektiver Frustrationen in Abhängigkeit von  $g$  im antia-diabatischen Bereich hin. Es stellt sich die Frage, ob nicht auch ein zu dem aus Referenz [2] analoger Flussgleichungszugang ausreicht, um den Phasenübergang erfassen zu können. Dies soll im Rahmen der folgenden Rechnung untersucht werden.

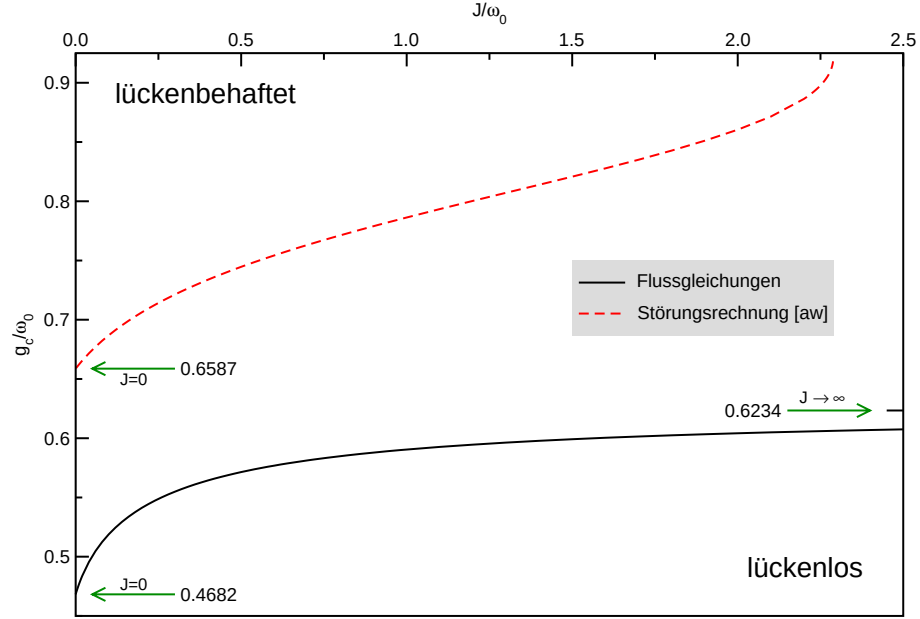
In Referenz [2] wurden nur Differenzkopplungen betrachtet. Auf demselben Niveau ist allerdings auch zwanglos die Behandlung einer lokalen Kopplung möglich, wenn der Ankopplungsoperator in seiner normalgeordneten Form

$$\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle) \quad (4.55)$$

betrachtet wird. Damit gilt in der unverzerrten Phase  $\langle \mathcal{A}_i(0) \rangle = 0$ . Dies kann durch eine Verschiebung  $\tilde{b}_i = b_i + cg/\omega_0$  in den Phonon-Operatoren erreicht

---

<sup>3</sup>vgl. die Fußnote 2 auf Seite 41



**Abbildung 11:**  $T = 0$ -Phasendiagramm der antiferromagnetischen Spin-Peierls-Kette mit lokaler Kopplung. Flussgleichungen in zweiter Ordnung  $g/\omega$  und Störungstheorie von *Weiß et al.* (aw) in vierter Ordnung  $g/\omega$  [54].

werden

$$\mathcal{H} = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + g \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} (b_i^\dagger + b_i) + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i \quad (4.56)$$

$$= \underbrace{\left( J - \frac{2g^2c}{\omega_0} \right)}_{=: \tilde{J}} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \omega_0 \sum_i \tilde{b}_i^\dagger \tilde{b}_i \quad (4.57)$$

$$+ g \sum_i \underbrace{(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - c)}_{=: \mathcal{A}_i(0)} (\tilde{b}_i^\dagger + \tilde{b}_i) + f(g, \omega_0, c) ,$$

wenn  $c := \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  gesetzt wird. Dabei ist  $f$  konstant und hängt nur von  $g$ ,  $\omega_0$  und  $c$  ab. Für den effektiven Spin-Hamiltonoperator findet man

$$\mathcal{H}_S^{\text{eff}} = \sum_i J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \Delta \mathcal{H}_X + \Delta \mathcal{H}_Y \quad (4.58)$$

$$\Delta \mathcal{H}_X = \frac{g^2}{4\omega_0} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (4.59)$$

$$\Delta \mathcal{H}_Y = \frac{\tilde{J}g^2}{2\omega_0^2} \coth\left(\frac{\omega_0}{2T}\right) \sum_i (-\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) , \quad (4.60)$$

woraus die effektiven Kopplungen  $J_1$  und  $J_2$  abgelesen werden können. Man beachte, dass über  $\Delta\mathcal{H}_Y$  implizit Beiträge der Ordnung  $g^4$  berücksichtigt werden, da  $\tilde{J}$  bereits einen  $g^2$ -Term enthält. Die kritische Kopplung  $g_c$  für  $T = 0$  ist

$$\frac{g_c^2}{\omega_0} = \frac{\gamma_c J - \sqrt{(\gamma_c J - \alpha_c \omega_0)^2 - 16c\alpha_c \gamma_c J \omega_0} - \alpha_c \omega_0}{4c\gamma_c}, \quad (4.61)$$

wobei die Abkürzung  $\gamma_c := 1 + \alpha_c$  eingeführt wurde. Für  $c = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  kann approximativ der exakte Wert für  $\alpha = 0$  eingesetzt werden, nämlich  $1/4 - \ln(2)$  [13]. Die Wahl für den genauen Zahlenwert von  $c$  hat keinen großen Einfluss auf  $g_c$ , da  $c$  nur zwischen  $1/4 - \ln(2) \approx -0.443$  und  $3/8 = -0.375$  (für die vollständig dimerisierte Kette) variieren kann, sodass die hier vorgenommene Näherung zulässig ist. In den Grenzwerten für verschwindende bzw. große Werte von  $J/\omega_0$  gilt dann

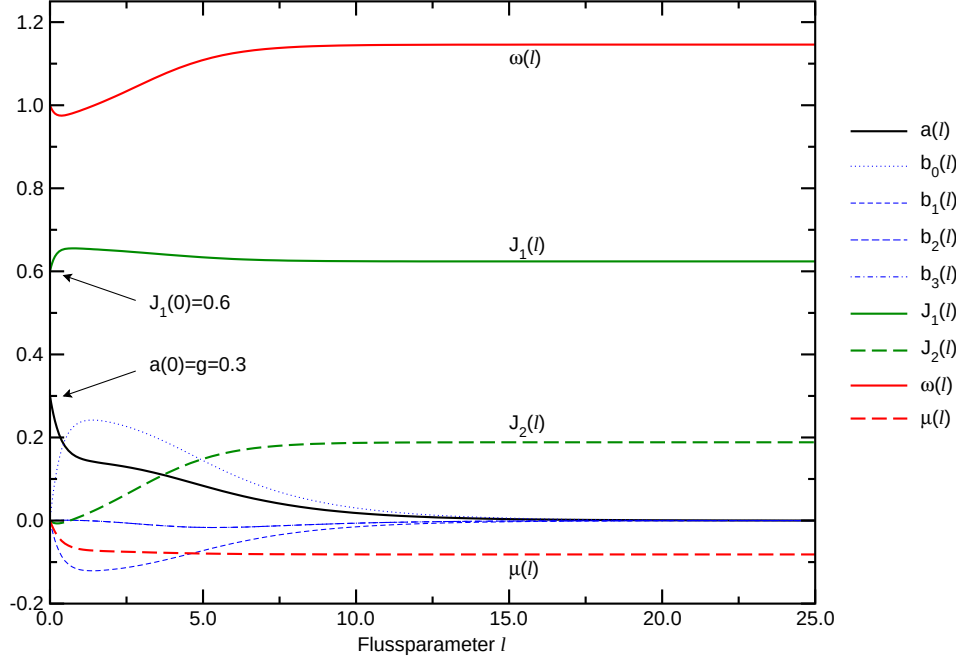
$$\lim_{J/\omega_0 \rightarrow 0} g_c/\omega_0 = \sqrt{\frac{-\alpha_c}{2c(1 + \alpha_c)}} \simeq 0.4682 \quad (4.62)$$

$$\lim_{J/\omega_0 \rightarrow \infty} g_c/\omega_0 = \sqrt{\frac{2\alpha_c}{1 + \alpha_c}} \simeq 0.6234. \quad (4.63)$$

Für Bereiche kleiner  $J/\omega_0$  verlaufen die Kurven der beiden Zugänge bis auf eine Verschiebung der Größenordnung  $J/\omega_0 \simeq 0.2$  in der kritischen Kopplung  $g_c$  ähnlich (vgl. Abbildung 11). Das Flussgleichungsergebnis liefert allerdings einen endlichen Wert für den Grenzwert  $J/\omega_0 \rightarrow \infty$ , wie er auch in den Flussgleichungsrechnungen für die Differenzkopplung gefunden wird. Auch die DMRG-Ergebnisse für die Differenzkopplung [53] zeigen keine Hinweise auf ein Anwachsen des Verhältnisses  $g_c/\omega_0$  im Limes großer Kopplungen. Vor diesem Hintergrund scheinen die Resultate, die über die Flussgleichungen in führender Ordnung in  $g/\omega$  und  $J/\omega$  mit einer normalgeordneten lokalen Kopplung erhalten wurden, zuverlässiger zu sein als die Resultate aus Referenz [54]. Zudem zeigt ein Vergleich mit dem Phasendiagramm aus Referenz [55], dass die Flussgleichungen die richtige Größenordnung der kritischen Kopplung vorhersagen. Ein Vergleich mit QMC-Daten auch für niedrige Werte von  $J/\omega_0$  (d. h.  $< 0.67$ ) wäre wünschenswert. Die Frage nach dem genauen Zahlenwert der kritischen Kopplung  $g_c$  für  $J/\omega_0 \rightarrow 0$  bleibt offen.

#### 4.4.4 Ergebnisse und Analyse

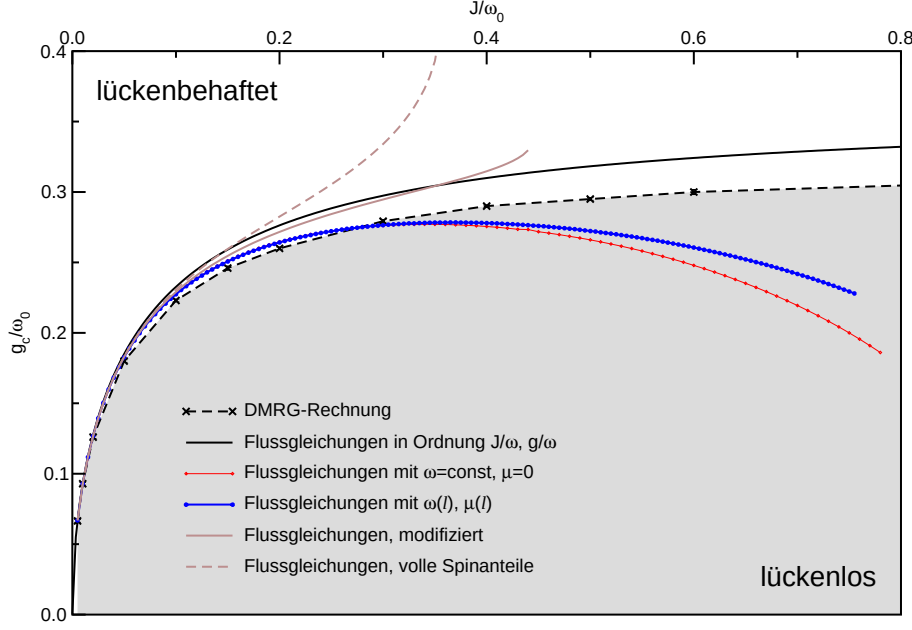
Die Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  für die Differenzkopplung werden nun numerisch gelöst. Für eine Wahl von Anfangsbedingungen  $J_1(0) = J$  und  $\alpha(0) = g$  erhält man dann effektive Kopplungen  $J_1^{\text{eff}}$  und  $J_2^{\text{eff}}$  sowie renormierte



**Abbildung 12:** Fluss der Koeffizienten in Ordnung  $\mathcal{L}$  für  $J_1(0) = J = 0.6$  und  $a(0) = g = 0.3$ . Die Übernächstnachbar-Wechselwirkung  $J_2(\ell)$  ist 0 für  $\ell = 0$  und entsteht erst durch den Übergang auf das effektive Spinmodell, für das die Spin-Phonon-Kopplungen  $a$  und  $b_i$  wegtransformiert sind. Die  $b_i$  sind die Koeffizienten von Kreuzprodukttermen im Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$ . Auf Seite 38 sind die Operatoren  $\mathcal{T}_i$  mit ihren Koeffizienten für die Ordnung  $\mathcal{L}$  zusammengestellt. Alle Größen werden in Einheiten von  $\omega_0$  gemessen.

Frequenzen  $\omega^{\text{eff}}$  und  $\mu^{\text{eff}}$  für den reinen Phononanteil. Aus diesen kann über  $\lambda_{\text{ph}} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2}$  [vgl. (4.35)] die Phononfrequenz im diagonalisierten  $\mathcal{H}_B$  bestimmt werden. War die Transformation erfolgreich, dann verschwindet der Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  im Limes  $\ell \rightarrow \infty$ , d.h. die Koeffizienten  $a(\ell \rightarrow \infty)$  und  $b_i(\ell \rightarrow \infty)$  ( $i = 0, \dots, 3$ ) gehen gegen Null.

In Abbildung 12 ist für die Parameterwahl  $J = 0.6$  und  $g = 0.3$  der Fluss der Koeffizienten in Abhängigkeit des Flussparameters  $\ell$  gezeigt. Im Bereich mittlerer  $\ell$  entstehen unter der kontinuierlichen Transformation neue Spin-Phonon-Wechselwirkungen in Form der Kreuzproduktterme aus dem Ansatz für  $\mathcal{A}_i(\ell)$ . Für große  $\ell$  verschwinden alle Koeffizienten im Kopplungsoperator. Dieses „Wegfließen“ der Kopplungen entspricht der kontinuierlichen Entkopplung von Spin- und Phononsystem. Der Hamiltonoperator liegt für  $\ell \rightarrow \infty$  in entkoppelter Form vor – mit den Anteilen  $\mathcal{H}_{S\infty} = \mathcal{H}_S^{\text{eff}}$  und  $\mathcal{H}_{B\infty} = \mathcal{H}_B^{\text{eff}}$ . Die Spin-Phonon-Wechselwirkung wurde somit in die effektiven Spin- und



**Abbildung 13:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$ . Als Vergleichskurven sind die DMRG-Resultate aus Referenz [53] und die der Flussgleichungsrechnung in führender Ordnung in  $J/\omega$  und  $g/\omega$  [2] eingezeichnet.

Phononanteile des Hamiltonoperators transformiert. Man erhält ein effektives Spinmodell, in dem Wechselwirkungen zwischen Spins auf voneinander weiter entfernten Gitterplätzen vorhanden sind. Es entsteht über die Kopplung  $J_2$  eine Übernächstnachbar-Wechselwirkung  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}$ , die die magnetische Wechselwirkung nächster Nachbarn frustriert. Die so durch die Spin-Phonon-Kopplung induzierte Frustration treibt das System in eine dimerisierte Phase (*Spin-Peierls-Phasenübergang*).

Die nichtverschwindende Frustration  $\alpha = J_2^{\text{eff}}/J_1^{\text{eff}}$  im effektiven Modell wird benutzt, um für  $T = 0$  ein Phasendiagramm mit der kritischen Spin-Phonon-Kopplung  $g_c = \alpha(0)$  in Abhängigkeit von der Nächstnachbar-Spin-kopplung  $J$  zu erhalten. Dazu sucht man für feste Werte von  $J$  die Kopplung  $g$ , die im effektiven Modell zu der kritischen Frustration  $\alpha_c$  führt. Es werden also die Nullstellen von

$$\alpha_c = \left( \lim_{\ell \rightarrow \infty} \alpha \right) \Big|_{g,J} \quad (4.64)$$

gesucht. Das Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$  ist in Abbildung 13 dargestellt. Als Vergleichskurven dienen in allen Phasendiagrammen die DMRG-Daten aus Referenz [53] sowie das Flussgleichungsergebnis in führender Ordnung in  $J/\omega$  und  $g/\omega$  [2]. Zur besseren Orientierung ist der Bereich unterhalb des

DMRG-Ergebnisses jeweils schattiert. Er gibt den Bereich unterkritischer Frustration  $\alpha < \alpha_c$  an, in dem das System lückenlose Anregungen besitzt ( $\Delta = 0$ ). Die Phasengrenzlinie bezeichnet die Paare  $(g, J)$ , die im effektiven Modell genau zu einer kritischen Frustration führen. Oberhalb liegt also die lückenbehaftete Phase vor, in der die elementaren Anregungen massiv sind.

Die mit nicht  $\ell$ -abhängigen  $\omega \equiv \text{const.}$  und  $\mu \equiv 0$  berechnete Kurve entspricht im Wesentlichen dem Flussgleichungsergebnis aus Referenz [51] und bietet somit eine Möglichkeit, die Korrektheit der C-Programme zu testen.

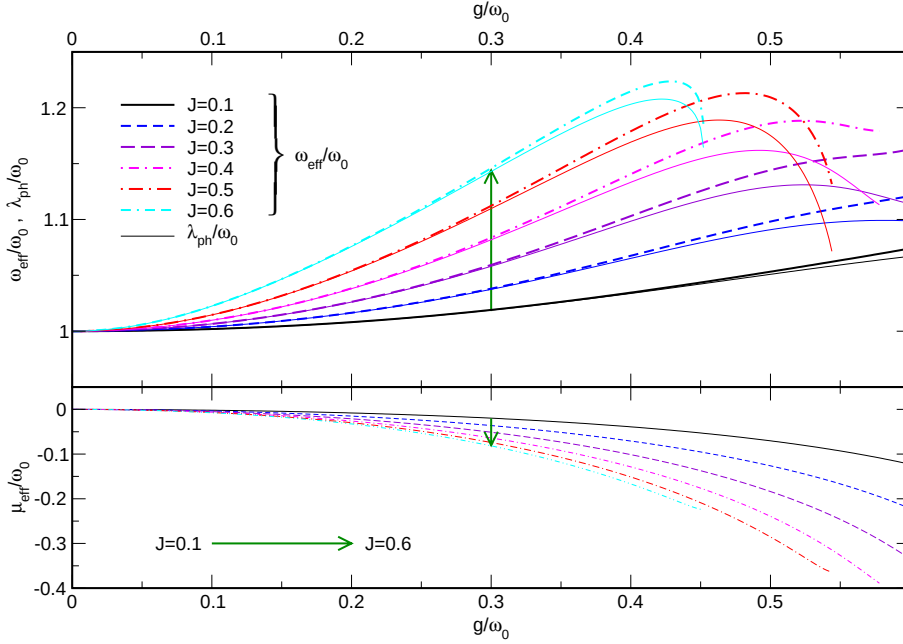
Die Kurve unter Einbeziehung der  $\ell$ -Abhängigkeiten von  $\omega$  und  $\mu$  zeigt nur eine leichte Veränderung. Im Bereich kleiner  $J/\omega_0 < 0.3$  stimmt die Flussgleichungsrechnung zwar fast perfekt mit den DMRG-Daten überein, aber das Abflachen im Bereich mittlerer  $J/\omega_0$  und das Abknicken für  $J/\omega_0 > 0.5$  bleibt auch unter Berücksichtigung der Renormierung von  $\omega(\ell)$  und  $\mu(\ell)$  erhalten.

Unter Verwendung der modifizierten Flussgleichungen knickt die Kurve nicht mehr ab, allerdings wird das kritische  $g_c$  leicht überschätzt, sodass diese Phasengrenzlinie zwischen den DMRG-Daten und den Flussgleichungsergebnissen in führender Ordnung  $J/\omega$  und  $g/\omega$  verläuft. Dadurch ist auch die Übereinstimmung mit den DMRG-Daten für kleine  $J/\omega_0$  nicht mehr ganz so gut.

Bei den Flussgleichungen mit vollem Spinanteil verstärkt sich dieser Effekt. Für kleine  $J/\omega_0$  ist die Kurve in Ordnung  $J/\omega$  und  $g/\omega$  zwar immer noch eine obere Schranke, für große  $J/\omega_0$  führt die Berücksichtigung der vollen Spinanteile nicht mehr zu sinnvollen Ergebnissen. Die Kurve reißt nach oben aus.

Die beiden Modifikationen der reinen Flussgleichungsrechnung in Ordnung  $\mathcal{L}$  unterdrücken also das Abknicken der Kurve durch Berücksichtigung zusätzlicher Terme, überschätzen aber die kritische Kopplung  $g_c$ . Die Entscheidung darüber, welche Spinprodukte in der Rechnung als Zwischenterme zugelassen werden, beeinflusst den Verlauf der Kurve entscheidend. Da die Tendenz der Phasengrenzlinie zumindest bei den modifizierten Flussgleichungen verbessert wird, liegt die Schlussfolgerung nahe, dass durch eine systematischere Berücksichtigung längerreichweitiger Beiträge die Ergebnisse weiter verbessert werden können. Eine solche Erweiterung des Zugangs wird in Kapitel 4.4.5 vorgenommen.

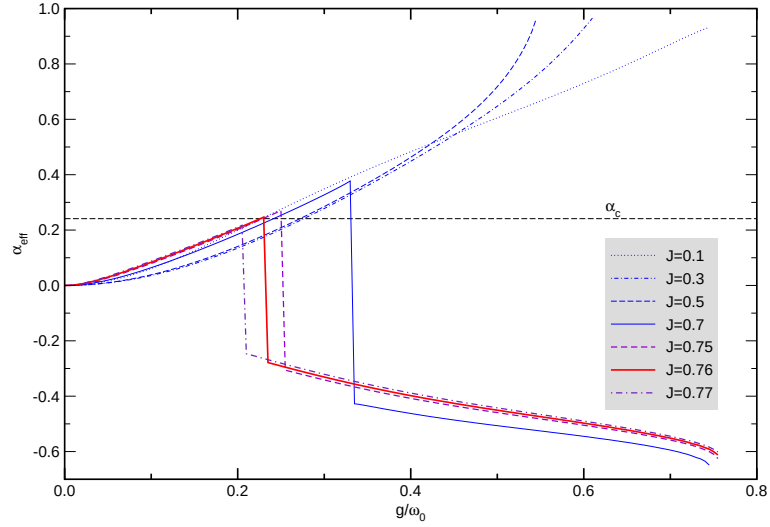
Zuerst sollen weitere Besonderheiten in den Ergebnissen der Flussgleichungsrechnung besprochen werden. Dies soll anhand der unmodifizierten Flussgleichungen geschehen. In Abbildung 14 sind die effektiven Werte  $\omega_{\text{eff}} = \omega_{\ell \rightarrow \infty}$  und  $\mu_{\text{eff}} = \mu_{\ell \rightarrow \infty}$  für feste Werte von  $J$  in Abhängigkeit von  $g$  aufgetragen. Die Änderung von  $\omega$  und  $\mu$  ist dabei umso stärker, je größer  $J$  und  $g$  sind.



**Abbildung 14:** Effektive Phononfrequenz  $\omega$ ,  $\mu$  und  $\lambda_{\text{ph}} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2}$  in Abhängigkeit von  $g$  für feste Werte von  $J$ . Die dicker gezeichneten Kurven in der oberen Abbildung sind die Werte für  $\omega(\ell)$  bei  $\ell = \infty$ . Die Transformation führt zu einer Erhöhung der Phononfrequenz. Die dünneren durchgezeichneten Kurven sind Frequenzen  $\lambda_{\text{ph}}$  des diagonalisierten  $\mathcal{H}_B$ , vgl. Gleichung (4.35). Man erkennt den schwachen Einfluss der in der unteren Abbildung gezeigten  $\mu(\ell)$ -Beiträge, die nur zu einer leichten Absenkung von  $\lambda_{\text{ph}}$  im Vergleich zu  $\omega_{\text{eff}}$  führt.

Nur für große Werte von  $g$  knickt  $\omega_{\text{eff}}(g)$  ab. Der Effekt durch den zusätzlichen nichtbosonzahlerhaltenden Term  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  im Hamiltonoperator ist klein, was man durch Vergleich von  $\omega_{\text{eff}}$  mit der Phononfrequenz  $\lambda_{\text{ph}} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2}$  (4.35) des diagonalisierten Phononanteils  $\mathcal{H}_B^{(\omega)} + \mathcal{H}_B^{(\mu)} \rightarrow \sum_i \lambda_{\text{ph}} \beta_i^\dagger \beta_i + \lambda_{\text{ph},0}$  (4.32) sieht. Die Kurven für  $\lambda_{\text{ph}}$  verlaufen nur wenig unterhalb derer für  $\omega_{\text{eff}}$ . Bemerkenswert ist das Anwachsen der Phononfrequenz im effektiven Modell im Vergleich zur Ausgangsfrequenz  $\omega_{\ell=0} = 1$ . In den Referenzen [31, 56] wird herausgestellt, dass ein solches *phonon hardening* auch im Rahmen einer Beschreibung nach *Cross und Fisher* erklärt werden kann. Hier ergibt sich im Rahmen der Flussgleichungsrechnung das „Hartwerden“ des Phonons zwanglos aus der erhöhten effektiven Phononfrequenz. Das *phonon hardening* kann qualitativ als Niveau-Abstoßung zwischen dem hochenergetischen Phononsystem und dem niederenergetischen Spinsystem verstanden werden.

Ein nächster Punkt, auf den noch nicht eingegangen wurde, ist das Ab-



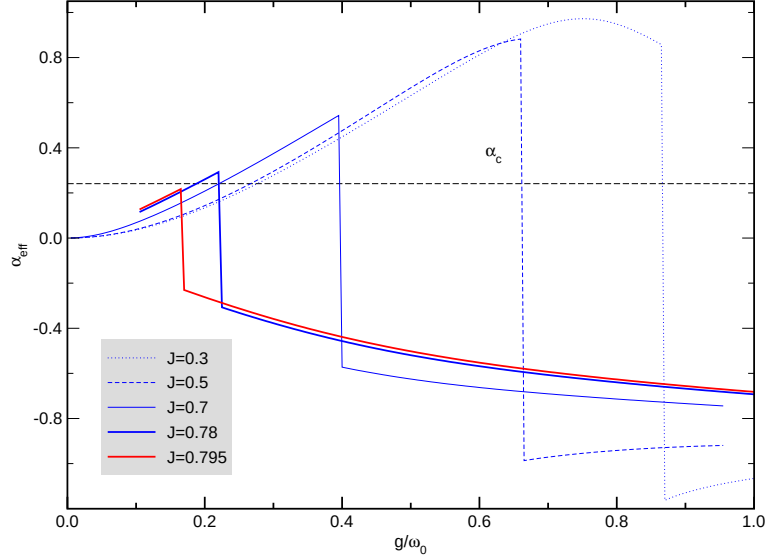
**Abbildung 15:** Effektive Frustration  $\alpha$  in Abhängigkeit von  $g$  für feste Werte von  $J$ . Für  $J > J^c \simeq 0.76$  wird die kritische Frustration  $\alpha_c \approx 0.241167$  nicht mehr erreicht. Für  $g > g^c(J)$  schlägt das Verhalten der Differentialgleichungen um und man erhält negative Werte für  $J_2$ .

brechen der Phasengrenzlinien bei einem Wert  $J^c$ , der, wie man in Abbildung 13 sieht, von der gewählten Methode in der Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  abhängt. Abbildung 15 gibt diesen Sachverhalt wieder. Für feste Werte von  $J$  sind die effektiven Frustrationen  $\alpha$  in Abhängigkeit von  $g$  aufgetragen. Die kritische Frustration  $\alpha_c$  wird oberhalb eines kritischen  $J^c$  nicht mehr erreicht. Eine sinnvolle Beschreibung des Phasenübergangs ist oberhalb  $J^c$  nicht mehr möglich. In der Nähe von  $J^c$  schlägt oberhalb eines von  $J$  abhängigen Wertes  $g^c$  das Verhalten der Differentialgleichungen um. Es entsteht z. B. eine negative Übernächstnachbar-Kopplung  $J_2$ , sodass  $\alpha(g)$  für  $g > g^c(J)$  auf einen negativen Wert springt.

Dieses Verhalten wurde bereits in Referenz [51] beobachtet. Für  $\omega \equiv \text{const.}$  und  $\mu \equiv 0$  kann dies reproduziert werden, allerdings nicht nur in der Nähe von  $J^c$  wie bei den Flussgleichungen mit  $\ell$ -abhängigem  $\omega$  und  $\mu$ , sondern für alle Werte von  $J$ . Dies ist in Abbildung 16 dargestellt.

In der Flussgleichungsrechnung *mit*  $\omega(\ell)$  und  $\mu(\ell)$  tritt dieses Phänomen nur bei Kopplungen  $J \gtrsim 0.5$  auf. Erhöht man für  $J \lesssim 0.5$  die Spin-Phonon-Kopplung  $g$  über einen bestimmten Wert, der mit abnehmendem  $J$  zunimmt (vgl. Abbildung 15), wird für ein  $\ell^c \neq \ell_\infty$   $\mu(\ell^c)$  betragsmäßig größer als  $\omega(\ell^c)$ . Die Wurzel  $\lambda_{\text{ph}} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2}$  aus der Bogoliubov-Transformation (4.35) wird im Laufe der Transformation imaginär, sodass der effektive





**Abbildung 16:** Effektive Frustration  $\alpha$  in Abhängigkeit von  $g$  für feste Werte von  $J$  unter Verwendung der Flussgleichungen mit  $\omega \equiv \text{const.}$  und  $\mu \equiv 0$ . Hier tritt der Umschlag auf eine negative Übernächstnachbar-Kopplung  $J_2$  für alle Werte von  $J$  auf, also nicht nur in der Nähe von  $J^c$ .

Hamiltonoperator nicht länger hermitesch ist. Die Lösung ist unphysikalisch. An dieser Stelle brechen die Kurven  $\alpha_{\text{eff}}(g)$  ab.

Über eine Analyse der Eigenwerte der Matrix  $\mathbf{T}(\ell)$  soll das Umschlagen der Differenzialgleichungen näher untersucht werden. Für die Eigenwerte von

$$\mathbf{T} = \mathbf{M}^2 + 2\omega\mathbf{M} + \lambda_{\text{ph}}^2 \mathbf{1} - 2\mu\mathbf{N} \quad [\text{vgl. (4.21)}]$$

findet man

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{\text{ph}}^2 + \frac{1}{2}\tilde{J}^2 \mp \sqrt{2\lambda_{\text{ph}}^2\tilde{J}^2} = \left(\lambda_{\text{ph}} \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{J}\right)^2 \quad (4.65)$$

$$\lambda_{3,4,5} = \lambda_{\text{ph}}^2 \quad (4.66)$$

wobei die Abkürzungen

$$\lambda_{\text{ph}}^2 = \omega^2 - \mu^2 \quad [\text{vgl. (4.35)}]$$

$$\tilde{J}^2 = 3J_1^2 + 5J_2^2 - 6J_1J_2 \quad (4.67)$$

eingeführt wurden.  $\lambda_{\text{ph}}$  entspricht der Phononfrequenz der diagonalisierten Form von  $\mathcal{H}_B$  (vgl. Seite 32). Um die Ursache des Entstehens einer negativen Übernächstnachbarkopplung  $J_2$  zu erklären, ist es günstiger, die Eigenwerte der Matrix  $\mathbf{U}$ , für die  $\mathbf{U}^2 = \mathbf{T}$  gilt, zu betrachten. Dass eine solche Matrix

$\mathbf{U}$  existiert, kann man sich folgendermaßen klar machen. Der Generator in der kanonischen wegnerschen Wahl ist

$$\eta = [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}] = [\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{\text{SB}}] .$$

Damit gilt für die Flussgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{d\ell} = [\eta, \mathcal{H}] &= [[\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{\text{SB}}], \mathcal{H}] = - [\mathcal{H}_d, \underbrace{[\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{\text{SB}}]}_{\cong \mathbf{U}\mathbf{v}}] + [[\mathcal{H}_d, \mathcal{H}_{\text{SB}}], \mathcal{H}_{\text{SB}}] , \\ &\underbrace{\hspace{10em}}_{\cong \mathbf{T}\mathbf{v} = \mathbf{U}^2\mathbf{v}} \end{aligned}$$

sodass  $\mathbf{T}$ , das über  $\frac{d\mathbf{v}(\ell)}{d\ell} = -\mathbf{T}(\ell)\mathbf{v}(\ell)$  die Flussgleichung für den Ankopplungsoperator bestimmt, als Produkt zweier Matrizen  $\mathbf{U}$  geschrieben werden kann. Für die Eigenwerte  $\tilde{\lambda}_i$  dieser Matrix gilt dann

$$\tilde{\lambda}_{1,2} = \lambda_{\text{ph}} \mp \frac{1}{\sqrt{2}}\tilde{J} \quad (4.68)$$

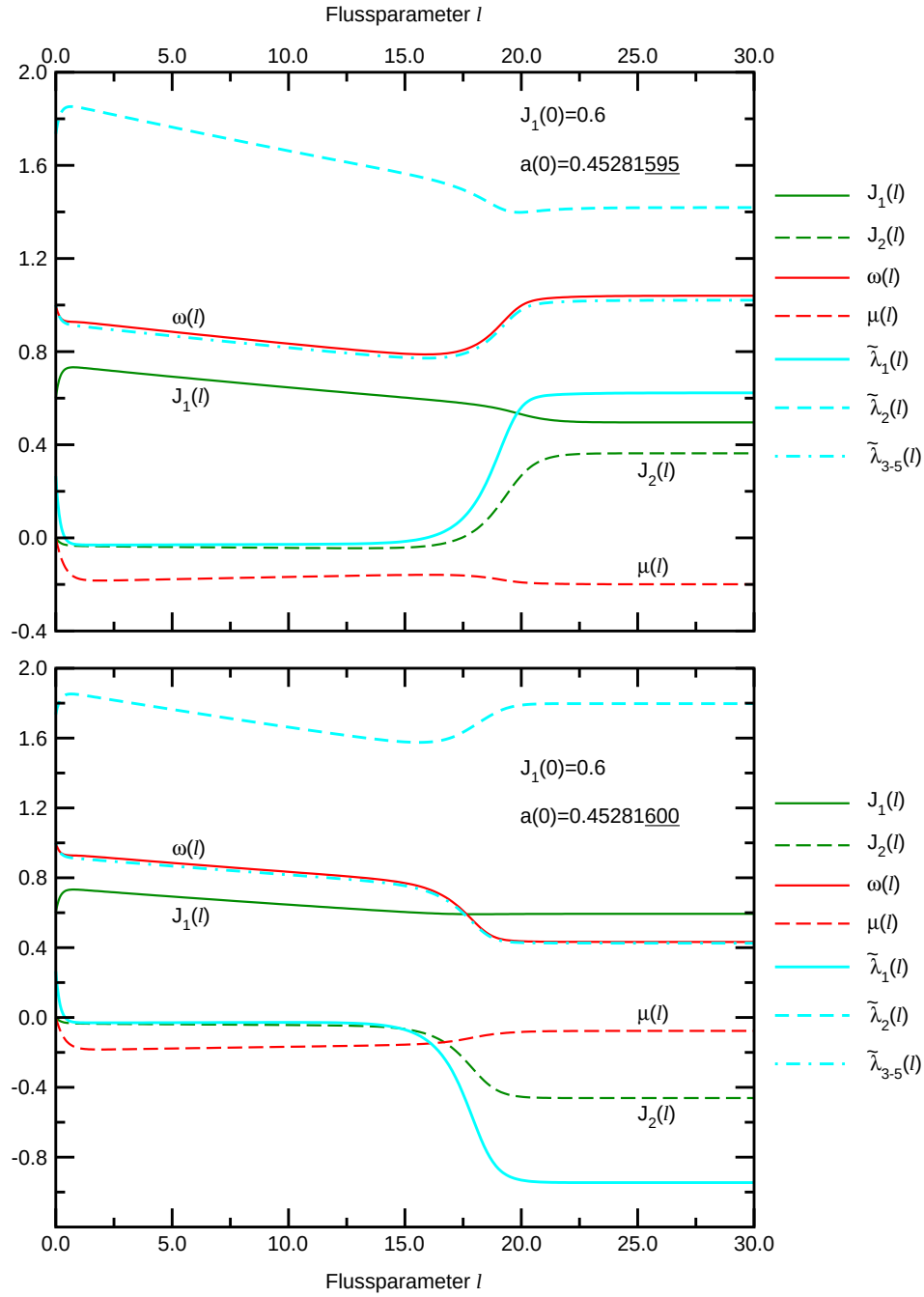
$$\tilde{\lambda}_{3,4,5} = \sqrt{\omega^2 - \mu^2} = \lambda_{\text{ph}} , \quad (4.69)$$

was auch direkt aus den  $\mathbf{T}$ -Eigenwerten  $\lambda_i$  abgelesen werden kann. Es ist klar, dass wegen  $\frac{d\mathbf{v}(\ell)}{d\ell} = -\mathbf{U}(\ell)^2\mathbf{v}(\ell)$  eine exponentielle Unterdrückung der Koeffizienten aus  $\mathbf{v}(\ell)$  im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  vorliegt. Da dies die  $\ell$ -abhängigen Spin-Phonon-Kopplungskonstanten aus  $\mathcal{H}_{\text{SB}}$  sind, ist damit auch formal bewiesen, dass die gewählte Transformation tatsächlich zu einem Verschwinden des Ankopplungsoperators  $\mathcal{A}_i(\ell)$  im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  führt.

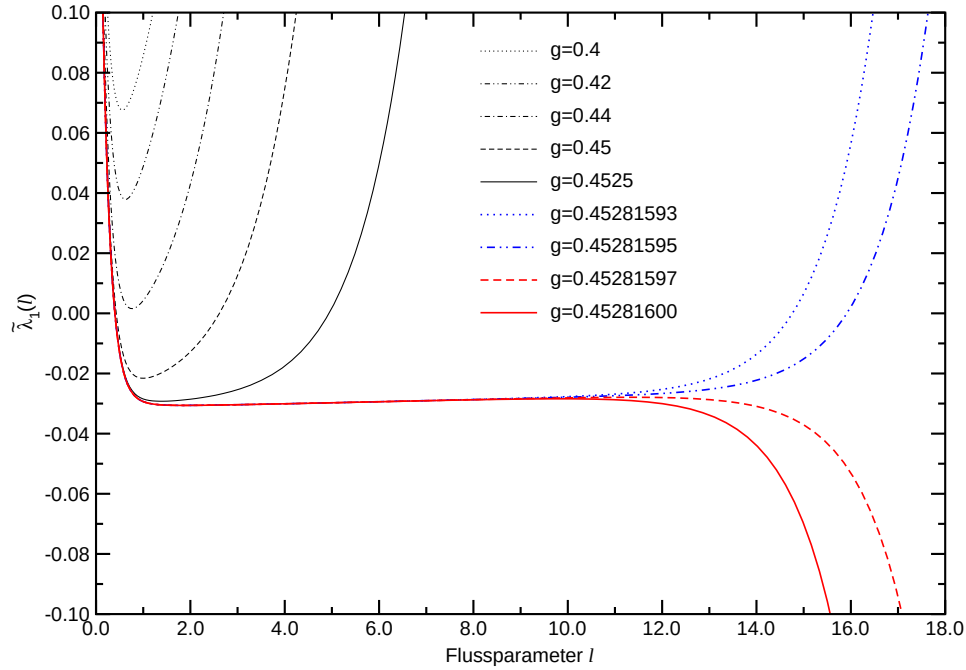
In Abbildung 17 ist der Fluss der Koeffizienten  $\omega$ ,  $\mu$ ,  $J_1$  und  $J_2$  sowie die  $\ell$ -Abhängigkeit der Eigenwerte  $\tilde{\lambda}_i$  für  $J = 0.6$  und zwei  $g$ -Werte in der Nähe der kritischen Kopplung  $g^c$  dargestellt. Der obere Plot zeigt die Renormierung der Koeffizienten für eine Kopplung  $g < g^c$ , die für kleine  $\ell$  mit der im unteren Plot gezeigten für  $g > g^c$  übereinstimmt. Man sieht, dass bei  $\ell \approx 15$  das Verhalten der gezeigten Größen trotz der nur kleinen Änderung  $\Delta g/\omega_0 = 5 \cdot 10^{-7}$  total umschlägt. Für  $g > g^c$  entsteht eine negative Übernächstnachbarkopplung  $J_2$ .

Die stärkste Veränderung bei Überschreiten der kritischen Kopplung  $g^c$  erfährt der Eigenwert  $\tilde{\lambda}_1$ . Dies ist in Abbildung 18 für  $J = 0.6$  und verschiedene Werte von  $g$  zusammengefasst. Trotz der nur kleinen Änderung in  $g$  beim Übergang von  $g = 0.45281595$  zu  $g = 0.45281597$  ändert sich der Verlauf von  $\tilde{\lambda}_1(\ell)$  drastisch.

Das Verhalten der Flussgleichungen für den Limes  $\ell \rightarrow \infty$  kann wie folgt charakterisiert werden. Man betrachtet dazu die Flussgleichung für den



**Abbildung 17:** Fluss der Koeffizienten in Ordnung  $\mathcal{L}$  für  $J = 0.6$  und  $g = 0.45281595$  bzw.  $g = 0.45281600$  (in Einheiten von  $\omega_0$ ). Zusätzlich sind die Eigenwerte  $\tilde{\lambda}_i$  der Matrix  $\mathbf{U}$  aufgetragen, für die  $\mathbf{U}^2 = \mathbf{T}$  gilt.



**Abbildung 18:** Fluss des Eigenwertes  $\tilde{\lambda}_1(\ell)$  der Matrix  $\mathbf{U}$  in Ordnung  $\mathcal{L}$  für  $J = 0.6$  und Werte von  $g$  zwischen 0.4 und 0.452816 (in Einheiten von  $\omega_0$ ). Für  $g \gtrsim 0.45281597$  schlägt das Verhalten von  $\tilde{\lambda}_1(\ell)$  um.

Koeffizientenvektor  $\mathbf{v}(\ell)$  (4.20)

$$\frac{d\mathbf{v}(\ell)}{d\ell} = -\mathbf{T}(\ell)\mathbf{v}(\ell) ,$$

für deren allgemeine Lösung ein Ansatz anhand einer Entwicklung der Exponentialfunktion gemacht wurde (vgl. Seite 28).

Alle Eigenwerte  $\lambda_i(\ell)$  von  $\mathbf{T}(\ell)$  sind positiv und (mindestens für  $\ell \rightarrow \infty$ ) deutlich verschieden von Null, sodass die dazugehörigen Eigenvektoren entsprechend  $e^{-\lambda_i \ell}$  abfallen. Dadurch überlebt nur der zum kleinsten Eigenwert  $\lambda_c$  gehörige Eigenvektor bis zu Bereichen mittlerer  $\ell$ . (Für  $g < g^c$  wird dies immer der Eigenwert  $\lambda_1$  sein, vgl. dazu mit Abbildung 17.) In diesem Bereich sei  $k(\ell)$  ein Maß für die Amplitude dieser letzten Mode, sodass  $k(\ell)$  die Komponenten von  $\mathbf{v}(\ell)$  bei großen  $\ell$  dominiert. Sie verschwindet für  $\ell \rightarrow \infty$  exponentiell mit  $\lambda_c(\ell \rightarrow \infty) =: \lambda_\infty$ , d. h.  $k(\ell) \propto e^{-\lambda_\infty \ell}$ .

Das Verhalten von  $k(\ell)$  in Bereichen mittlerer bis großer  $\ell$  wird also von der Differenzialgleichung für  $\mathbf{v}(\ell)$  bestimmt. Damit kann das Verhalten von  $\lambda_c(\ell)$  in diesem Regime nur von den Flussgleichungen für die Austauschkopplungen  $J_1$  und  $J_2$  abhängen. So beeinflusst  $\lambda_c(\ell)$  über die  $J_1$ - und  $J_2$ -Abhängigkeit der Differenzialgleichung für  $\mathbf{v}(\ell)$  letztendlich auch  $k(\ell)$ . In

der Flussgleichung für  $J_1$  und  $J_2$  (4.40) kommt der Kopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  nur quadratisch vor. Damit sind auch  $\frac{dJ_1(\ell)}{d\ell}$  und  $\frac{dJ_2(\ell)}{d\ell}$  bilinear in den Kopplungen  $a$  und  $b_i$  ( $i=0, \dots, 3$ ). Dies erkennt man besser in den vollständig ausgeschriebenen Differenzialgleichungen in Anhang B.1 auf Seite 79. Die Ableitung  $\frac{d\lambda_c(\ell)}{d\ell}$  ist damit für große  $\ell$  proportional zu  $k^2$ .

Damit kann man für  $k(\ell)$  und  $\lambda_c(\ell)$  das gekoppelte Differenzialgleichungssystem

$$\frac{dk}{d\ell} = -\lambda_c k \quad \text{und} \quad \frac{d\lambda_c}{d\ell} = \pm k^2 \quad (4.70)$$

aufstellen. Das Vorzeichen des  $k^2$ -Terms in der Differenzialgleichung für  $\lambda_c$  kann nicht eindeutig festgelegt werden, da  $k$  in der ersten Differenzialgleichung auf beiden Seiten linear und in der zweiten quadratisch vorkommt. Damit erhält man auch zwei Paare von Lösungen für das System (4.70).

Für  $\frac{d\lambda_c}{d\ell} = -k^2$  soll kurz ein möglicher Lösungsweg skizziert werden. Durch nochmaliges Differenzieren von  $\frac{d}{d\ell} \ln k = -\lambda_c$  und Einsetzen von  $\frac{d\lambda_c(\ell)}{d\ell} = -k^2$  findet man eine autonome Differenzialgleichung, die nur noch  $k$  (und  $\ell$  nicht explizit) enthält

$$kk'' - (k')^2 = k^4. \quad (4.71)$$

Mit der Substitution  $k' = p$  und  $k'' = p dp/dk$  erhält man eine Differenzialgleichung vom Bernoulli-Typ  $p' + \phi(k)p = \psi(k)p^n$  ( $n \neq 1$ )

$$\frac{dp}{da} - \frac{p}{a} = \frac{a^3}{p}, \quad (4.72)$$

deren allgemeine Lösung auf

$$k(\ell) = \frac{c_1}{\sinh[c_1(c_2 + \ell)]} \quad (4.73)$$

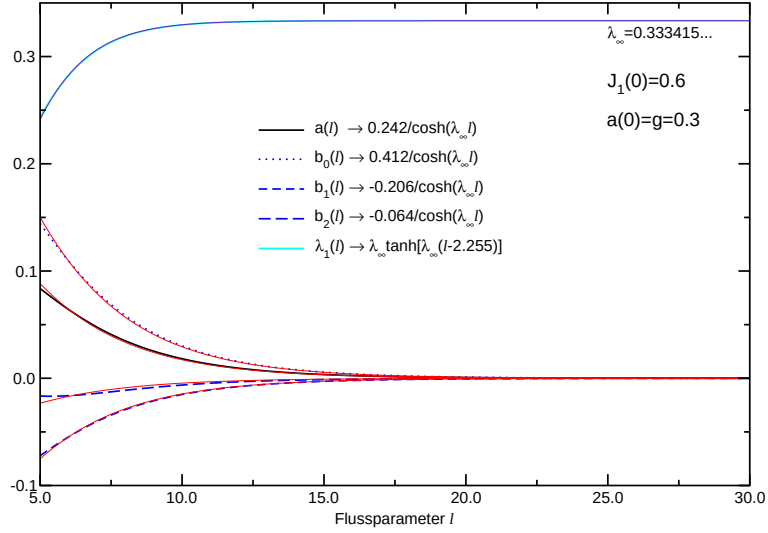
führt. Durch Einsetzen von  $k(\ell)$  in  $\frac{d\lambda_c(\ell)}{d\ell} = -k^2$  und Integration findet man  $\lambda_c(\ell)$ .

Zusammenfassend ergeben sich für die beiden Systeme (4.70) die Lösungen

$$k^+(\ell) = \frac{c_1}{\cosh[c_1(c_2 + \ell)]} \quad \text{und} \quad \lambda_c^+(\ell) = c_1 \tanh[c_1(c_2 + \ell)] \quad (4.74)$$

$$k^-(\ell) = \frac{c_1}{\sinh[c_1(c_2 + \ell)]} \quad \text{und} \quad \lambda_c^-(\ell) = c_1 \coth[c_1(c_2 + \ell)], \quad (4.75)$$

wobei die oberen Indizes  $\{+, -\}$  das Vorzeichen in der Differenzialgleichung für  $\lambda_c$  angeben [vgl. Gleichung (4.70)]. Zum Fitten der Kopplungskoeffizienten  $a$  und  $b_i$  sowie des kleinsten Eigenwertes  $\lambda_c$  reicht es aus, folgende



**Abbildung 19:** Darstellung der  $\ell$ -Abhängigkeiten der Kopplungen  $a(\ell)$  und  $b_i(\ell)$  und des Eigenwertes  $\lambda_1(\ell)$  für  $J = 0.6$  und  $g = 0.3$  im Bereich mittlerer und großer  $\ell$  in Ordnung  $\mathcal{L}$ . Die Funktion  $\lambda_\infty \tanh[\lambda_\infty(\ell + d_{\text{fit}})]$  gibt das Verhalten von  $\lambda_1(\ell)$  beinahe exakt wieder. Die Kopplungen können über  $c_{\text{fit}}/\cosh(\lambda_\infty \ell)$  gefittet werden.

Funktionen zu betrachten

$$k^+(\ell) = \frac{c_{\text{fit}}}{\cosh(\lambda_\infty \ell)} \quad \text{und} \quad \lambda_c^+(\ell) = \lambda_\infty \tanh[\lambda_\infty(\ell + d_{\text{fit}})] \quad (4.76)$$

$$k^-(\ell) = \frac{c_{\text{fit}}}{\sinh(\lambda_\infty \ell)} \quad \text{und} \quad \lambda_c^-(\ell) = \lambda_\infty \coth[\lambda_\infty(\ell + d_{\text{fit}})] \quad (4.77)$$

wobei  $\lambda_\infty$  den Wert von  $\lambda_c$  bei  $\ell = \infty$  bezeichnet. Dieser kann dem durch die Runge-Kutta-Routinen für ein sehr großes  $\ell$  errechneten Wert gleichgesetzt werden (hier:  $\ell = 50000$ ).

In Abbildung 19 ist für denselben Parametersatz wie in Abbildung 12 die  $\ell$ -Abhängigkeit des kleinsten Eigenwertes  $\lambda_1$  und die der Spin-Phonon-Kopplungen  $a$  und  $b_i$  ab  $\ell = 5$  gezeigt. Über Fits gemäß Gleichung (4.76) kann die hervorragende Übereinstimmung mit den aufgetragenen Größen erreicht werden, wie sie in der Abbildung zu sehen ist. Für  $g < g^c$  sind dazu die Lösungen  $k^+(\ell)$  und  $\lambda^+(\ell)$  heranzuziehen. Für  $g > g^c$  können aber auch die Abhängigkeiten  $k^-(\ell)$  und  $\lambda^-(\ell)$ , wie sie in (4.77) angegeben sind, auftreten.

**Fazit.** Die Erweiterungen, die im Vergleich zu Referenz [51] in diesem Abschnitt vorgenommen wurden, nämlich die Einbeziehung des Beitrags  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  und die Berücksichtigung einer  $\ell$ -Abhängigkeit von  $\omega$  und  $\mu$ , führen zu ei-

nem Resultat, das im Bereich  $0 < J/\omega_0 < 0.2$  mit den DMRG-Daten im Rahmen der von *Bursill et al.* angegebenen Fehlergrenzen übereinstimmt. Bis  $0 < J/\omega_0 < 0.4$  sind die Ergebnisse noch als gut zu bezeichnen. Oberhalb von  $J/\omega_0 \approx 0.4$  knickt die Kurve ab und endet bei  $J/\omega_0 \approx 0.76$ , da für  $J \gtrsim 0.76$  die kritische Frustration  $\alpha_c$  für keinen Wert von  $g$  erreicht wird. Die Kurven  $\alpha_{\text{eff}}(g)$  (für feste Werte von  $J$ ) brechen für große Werte von  $g$  ab, da dort die Flussgleichungen unphysikalische Ergebnisse (nichthermitesche effektive Hamiltonoperatoren) liefern. Zudem gibt es einen Wert  $g^c(J)$ , an dem sich das Verhalten der Flussgleichungen ändert und im effektiven Spinmodell eine negative Übernächstnachbarkopplung  $J_2$  entsteht.

Die beiden vorgenommenen Modifikationen, deren Ziel es war, ein Abknicken der Phasengrenzlinie zu verhindern, produzieren für alle  $J/\omega_0$  zu große kritische Kopplungen  $g_c$ . Das Mitnehmen zusätzlicher Spinprodukte alleine scheint nicht die Lösung zu sein, wie man die Beschreibung auf  $J/\omega_0 > 0.2$  ausdehnen kann. Dass diese zusätzlichen Beiträge aber erheblichen Einfluss auf den Fluss von  $J_1$  und  $J_2$  haben, sieht man an der starken Veränderung der Kurven im Vergleich zu den unmodifizierten Flussgleichungen. Im nächsten Abschnitt wird diesem Sachverhalt Rechnung getragen, indem zwei neue Kopplungskonstanten  $J_3(\ell)$  und  $J_4(\ell)$  eingeführt und renormiert werden. Sie stehen für eine Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen dritt- und viertnächsten Nachbarn.

#### 4.4.5 Lineare Spinwellentheorie: Einbeziehung von $J_3$ und $J_4$

Im letzten Abschnitt wurden die Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  gelöst. Es wurden zwei Modifikationen vorgestellt, die zusätzliche Spinprodukte berücksichtigen. Dabei hat sich gezeigt, dass der Einfluss längerreichweitiger Beiträge groß ist und dass sie das Phasendiagramm entscheidend beeinflussen. Da sowohl die modifizierten Flussgleichungen als auch die Flussgleichungen mit vollem Spinanteil die kritische Kopplung  $g_c$  überschätzen, muss eine Möglichkeit gefunden werden, längerreichweitige Anteile auf systematischere Art und Weise in die Theorie aufzunehmen. Da der Beitrag von Skalarprodukten des Typs  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+3}$  und  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+4}$  besonders groß ist, bietet es sich an, zwei neue Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  einzuführen, die die Stärke der Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen dritt- und viertnächsten Nachbarn im effektiven Modell angeben. Der Ausgangshamiltonoperator soll dabei nicht verändert werden, sodass der Generator  $\eta$  und die Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  unverändert bleiben. Die Flussgleichungen für  $J_3(\ell)$  findet man dann mittels Koeffizientenvergleich über den Kommutator  $[\eta, \mathcal{H}_{\text{SB}}]$  (4.30), wobei  $J_3(\ell = 0) = 0$  gilt. Die Ableitung  $\frac{dJ_3(\ell)}{d\ell}$  ist also der Vorfaktor des  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+3}$ -Anteils aus Gleichung

(4.40). Für  $J_4$  geht man analog vor.

Da im entkoppelten effektiven Modell nun zwei zusätzliche Kopplungen vorhanden sind, die kritische Frustration  $\alpha_c$  aber nur für das  $J_1$ - $J_2$ -Modell bekannt ist, muss eine Möglichkeit gefunden werden, die Anwendbarkeit des  $\alpha_c$ -Kriteriums auf ein Modell mit vier Austauschkopplungen  $J_i$  zu erweitern. Eine Vorgehensweise ist die Herleitung von zwei effektiven Kopplungen  $J_1^{\text{sw}}(\ell)$  und  $J_2^{\text{sw}}(\ell)$  über die Theorie linearer Spinwellen (LSW) (siehe z. B. Kapitel 11 in Referenz [57]).  $J_1^{\text{sw}}(\ell)$  und  $J_2^{\text{sw}}(\ell)$  werden dann von  $J_1(\ell)$ ,  $J_2(\ell)$ ,  $J_3(\ell)$  und  $J_4(\ell)$  abhängen. Man erhält eine effektive Frustration  $\alpha^{\text{sw}}(\ell) = J_2^{\text{sw}}/J_1^{\text{sw}}$ , auf die dann das  $\alpha_c$ -Kriterium zur Bestimmung der Phasengrenze angewendet werden kann. Es sei betont, dass „effektiv“ in diesem Zusammenhang nicht den Limes  $\ell \rightarrow \infty$ , sondern die Anwendung der linearen Spinwellentheorie zur Ableitung zweier Kopplungen bezeichnet, die Effekte aller vier  $J_i(\ell)$  beinhalten.

Zur Herleitung von  $J_1^{\text{sw}}$  und  $J_2^{\text{sw}}$  startet man mit einem Hamiltonoperator, der Kopplungen in allen betrachteten Reichweiten enthält

$$\mathcal{H} = \sum_i (J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} + J_3 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+3} + J_4 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+4}) . \quad (4.78)$$

Dann wählt man das Koordinatensystem so, dass der klassische Néel-Zustand die Richtung von  $\hat{z}$  bzw.  $-\hat{z}$  auf den Untergittern  $\mathcal{A}$  bzw.  $\mathcal{B}$  hat (vgl. Abbildung 20). Definiert man für  $j \in \mathcal{B}$  die rotierten Spins  $\tilde{\mathbf{S}}$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_j^z &= -S_j^z \\ \tilde{S}_j^x &= S_j^x \\ \tilde{S}_j^y &= -S_j^y, \end{aligned} \quad (4.79)$$

dann gehorchen die  $\tilde{S}^\alpha$  denselben Kommutatorrelationen wie die  $S^\alpha$ . Der Hamiltonoperator wird jetzt einer Holstein-Primakoff-Transformation

$$\begin{aligned} S_i^+ &= (\sqrt{2S - n_i}) b_i \\ S_i^- &= b_i^\dagger \sqrt{2S - n_i} \\ S_i^z &= -n_i + S \end{aligned} \quad (4.80)$$

unterzogen, die die Spin-Auf- und -Absteiger auf Bosonen-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $b_i^\dagger$  und  $b_i$  abbildet, für die  $[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$  und  $[b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0$  gilt. Dabei ist  $n_i = b_i^\dagger b_i$  der Teilchenzahloperator. Die Gleichungen (4.80) können dann über

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &\equiv 1/2(S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) + S_i^z S_j^z \quad \text{für } j \in \mathcal{A} \\ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &\equiv 1/2(S_i^+ \tilde{S}_j^- + S_j^+ \tilde{S}_i^-) - S_i^z \tilde{S}_j^z \quad \text{für } j \in \mathcal{B} \end{aligned} \quad (4.81)$$



in den Hamiltonoperator (4.78) eingesetzt werden. Die Wurzeln aus (4.80) werden in führender Ordnung in  $S$  entwickelt und man erhält

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_i \bigg\{ & J_1 \left[ S(n_i + n_{i+1} + b_i b_{i+1} + b_i^\dagger b_{i+1}^\dagger) - S^2 \right] \\ & + J_3 \left[ (i+1) \rightarrow (i+3) \right] \\ & + J_2 \left[ S(-n_i - n_{i+2} + b_i^\dagger b_{i+2} + b_{i+2}^\dagger b_i) + S^2 \right] \\ & + J_4 \left[ (i+2) \rightarrow (i+4) \right] \bigg\} + \mathcal{O}(1/S) + \mathcal{O}(b^4) . \end{aligned} \quad (4.82)$$

Die Fouriertransformation des Hamiltonoperators und eine Spezialisierung auf  $S=1/2$  führt zu

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \stackrel{\mathcal{F}}{=} 2S \sum_k \bigg\{ & J_1 \left[ b_k^\dagger b_k + \cos k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \right] \\ & + J_3 \left[ \cos k \rightarrow \cos(3k) \right] \\ & + J_2 \left[ -b_k^\dagger b_k + \cos(2k) b_k^\dagger b_k \right] \\ & + J_4 \left[ \cos(2k) \rightarrow \cos(4k) \right] \bigg\} \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$\begin{aligned} \stackrel{2S=1}{=} \sum_k \bigg\{ & \overbrace{[J_1 + J_3 + J_2(\cos(2k) - 1) + J_4(\cos(4k) - 1)]}^{\tilde{J}_k :=} b_k^\dagger b_k \\ & + \underbrace{[J_1 \cos k + J_3 \cos(3k)]}_{=: \tilde{\gamma}_k} (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \bigg\} . \end{aligned} \quad (4.84)$$

Zur Diagonalisierung muss auf den fouriertransformierten Hamiltonoperator

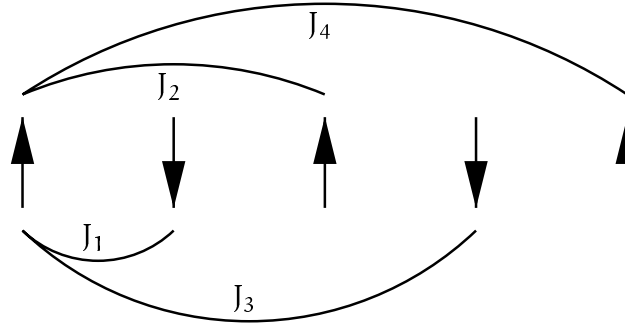
$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_k \left\{ \tilde{J}_k b_k^\dagger b_k + \tilde{\gamma}_k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \right\} \quad (4.85)$$

$$=: \sum_k \left\{ \omega_k \beta_k^\dagger \beta_k + \omega_0 \right\} \quad (4.86)$$

eine Bogoliubov-Transformation (4.33)

$$\beta_q = u_q b_q - v_q b_{-q}^\dagger \quad \text{und} \quad \beta_q^\dagger = u_q b_q^\dagger - v_q b_{-q} \quad (4.87)$$

angewandt werden. Für  $\omega_k$  findet man nach Einsetzen von  $\tilde{\gamma}_k$  und  $\tilde{J}_k$  aus Gleichung (4.84) und Entwickeln der Kosinus-Funktionen bis zur zweiten



**Abbildung 20:** Zur Spinrotation auf dem ↓-Untergitter

Ordnung in  $k$

$$\omega_k = \sqrt{\tilde{J}_k^2 - \tilde{\gamma}_k^2} \simeq c^{(J_1 \dots J_4)} k + \mathcal{O}(k^2) \quad (4.88)$$

$$c^{(J_1 \dots J_4)} = \sqrt{J_1^2 + 10J_1J_3 + 9J_3^2 - 4(J_1 + J_3)(J_2 + 4J_4)} \quad (4.89)$$

$$c^{(J_1, 2)} = \sqrt{J_1^2 - 4J_1J_2} \quad (\text{nur } J_1 \text{ und } J_2) . \quad (4.90)$$

Durch Vergleich von  $c^{(J_1 \dots J_4)}$  mit  $c^{(J_1, 2)}$  erhält man schließlich die effektiven Kopplungskonstanten  $J_1^{\text{sw}}$  und  $J_2^{\text{sw}}$  sowie die effektive Frustration  $\alpha^{\text{sw}}$

$$J_1^{\text{sw}} = \sqrt{(J_1 + 9J_3)(J_1 + J_3)} \quad (4.91)$$

$$J_2^{\text{sw}} = \sqrt{\frac{J_1 + J_3}{J_1 + 9J_3}} (J_2 + 4J_4) \quad (4.92)$$

$$\alpha^{\text{sw}} = \frac{J_2^{\text{sw}}}{J_1^{\text{sw}}} = \frac{J_2 + 4J_4}{J_1 + 9J_3} . \quad (4.93)$$

Es gibt nun mehrere Möglichkeiten, diese in den Flussgleichungsformalismus einzubauen.

1. Die einfachste Art, die zusätzlichen Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  mit in die Rechnung aufzunehmen, ist, die Nullstellensuche von  $\alpha_c - \alpha$  nicht mit  $\alpha_{\text{eff}} = J_2^{\text{eff}}/J_1^{\text{eff}}$  sondern mit  $\alpha^{\text{sw}}$  durchzuführen

$$\alpha_c - \alpha_{\ell \rightarrow \infty}^{\text{sw}} = 0 . \quad (4.94)$$

Die Formel für  $\alpha^{\text{sw}}$  (4.93) muss dabei bei  $\ell = \infty$  ausgewertet werden. Bei dieser Methode gibt es also keine Rückkopplung von  $J_3$  und  $J_4$  in die übrigen Flussgleichungen. Die Differenzialgleichungen  $\frac{dJ_3(\ell)}{d\ell}$  und  $\frac{dJ_4(\ell)}{d\ell}$  werden vollkommen separat gelöst, um die effektiven Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  dann zusammen mit den Werten von  $J_1(\ell = \infty)$  und  $J_2(\ell = \infty)$  in  $\alpha^{\text{sw}}$  einzuspeisen. In den Phasendiagrammen wird dieses Verfahren mit  $\alpha^{\text{sw}}$  bezeichnet.

2. Um die Beiträge durch  $J_3$  und  $J_4$  in den Differenzialgleichungen der anderen Koeffizienten direkt zu berücksichtigen, ist es notwendig, die Flussgleichungen für  $J_1$  und  $J_2$  zu modifizieren. Dazu differenziert man die Gleichungen (4.91) und (4.92) nach dem Flussparameter  $\ell$ . Man erhält zwei Differenzialgleichungen  $\frac{dJ_1^{\text{sw}}}{d\ell}$  und  $\frac{dJ_2^{\text{sw}}}{d\ell}$ , in die alle  $J_i(\ell)$  und  $\frac{dJ_i(\ell)}{d\ell}$  eingehen. *Nach* deren Berechnung wird

$$\frac{dJ_1(\ell)}{d\ell} := \frac{dJ_1^{\text{sw}}}{d\ell} \quad \text{und} \quad \frac{dJ_2(\ell)}{d\ell} := \frac{dJ_2^{\text{sw}}}{d\ell} \quad (4.95)$$

gesetzt. Auf diese Weise koppeln  $J_3$  und  $J_4$  in die Flussgleichungen für  $J_1$  und  $J_2$  und damit auch in alle übrigen, da die Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$  die Austauschkopplungen  $J_1$  und  $J_2$  enthalten. Zur Bezeichnung dieser Methode wird das Kürzel  $d^{\text{sw}}$  verwendet.

3. Die Variante 2 kann vereinfacht werden, indem man in  $\frac{dJ_1^{\text{sw}}}{d\ell}$  und  $\frac{dJ_2^{\text{sw}}}{d\ell}$  folgende Näherungen macht

$$J_3 \approx 0 \quad \text{und} \quad J_4 \approx 0 \quad (4.96)$$

$$J_1^{\text{sw}} \approx J_1 \quad \text{und} \quad J_2^{\text{sw}} \approx J_2. \quad (4.97)$$

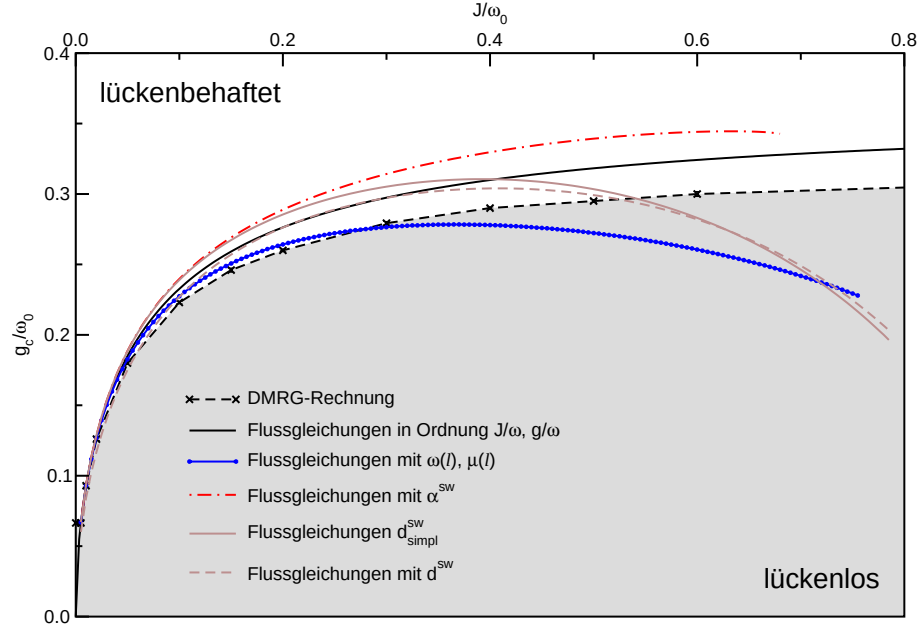
Die absoluten Werte von  $J_3$  und  $J_4$  werden also als klein angenommen. Auch die Änderungen von  $J_1^{\text{sw}}$  gegenüber  $J_1$  bzw.  $J_2^{\text{sw}}$  gegenüber  $J_2$  werden vernachlässigt. In  $\frac{dJ_1^{\text{sw}}}{d\ell}$  und  $\frac{dJ_2^{\text{sw}}}{d\ell}$  bleiben also nur die Größen  $J_1$  und  $J_2$  selbst und die vier Ableitungen  $\frac{dJ_i(\ell)}{d\ell}$  erhalten. So erhält man die einfachen Differenzialgleichungen

$$\frac{dJ_1^{\text{sw}}}{d\ell} = \frac{dJ_1}{d\ell} + 5 \frac{dJ_3}{d\ell} \quad (4.98)$$

$$\frac{dJ_2^{\text{sw}}}{d\ell} = \frac{dJ_2}{d\ell} + 4 \left( \frac{dJ_4}{d\ell} - \alpha \frac{dJ_3}{d\ell} \right), \quad (4.99)$$

die für  $\frac{dJ_3}{d\ell} = 0$  und  $\frac{dJ_4}{d\ell} = 0$  wieder auf die ursprünglichen Differenzialgleichungen zurückführen. (Dieser Konsistenzcheck gelingt natürlich auch bei den in Methode  $d^{\text{sw}}$  ohne die Näherungen verwendeten Flussgleichungen für  $J_1^{\text{sw}}$  und  $J_2^{\text{sw}}$ .) In den Graphen sind die Ergebnisse dieses Verfahrens mit  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$  gekennzeichnet.

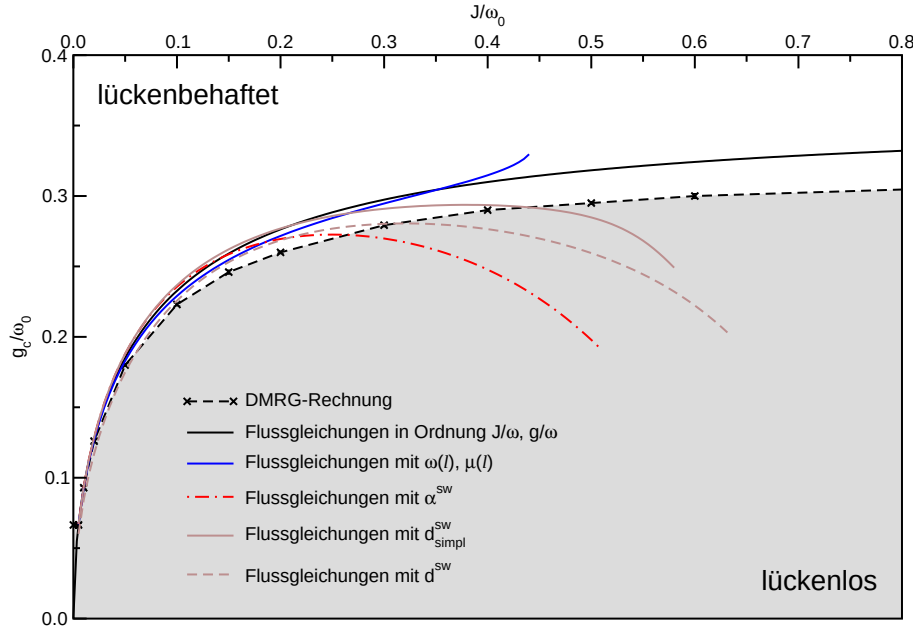
Im Folgenden werden die Ergebnisse in Form der Phasendiagramme mit der kritischen Kopplung  $g_c$  in Abhängigkeit von  $J$  für die drei Methoden, die Matrix  $\mathbf{M}$  in die Berechnungen der Spinanteile einzubeziehen, mit jeweils den drei Modifikationen aus der linearen Spinwellentheorie  $\alpha^{\text{sw}}$ ,  $d^{\text{sw}}$  und  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$  vorgestellt. Die Daten aus der Flussgleichungsrechnung in führender



**Abbildung 21:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$  unter Einbeziehung von  $J_3$  und  $J_4$  mittels linearer Spinwellentheorie.

Ordnung  $J/\omega$  und  $g/\omega$ , die DMRG-Ergebnisse und eine Kurve, die ohne Berücksichtigung von  $J_3$  und  $J_4$  erhalten wurde, sind zusätzlich in den Phasendiagrammen dargestellt.

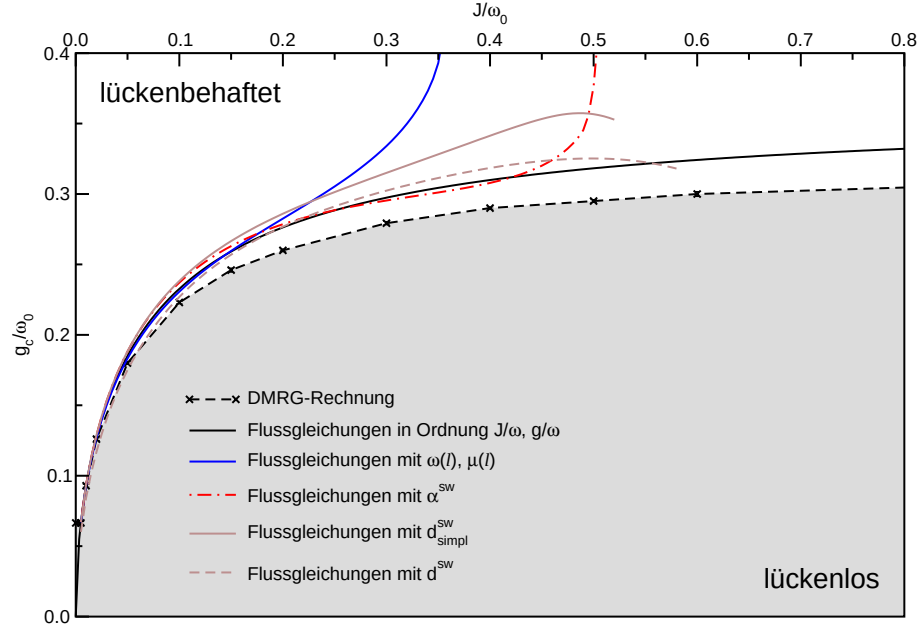
Für die Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  unter voller Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  (Abbildung 21) bringt die Berücksichtigung von Flussgleichungen für die Austauschkopplungen dritt- und viertnächster Nachbarn keine Verbesserung. Das war hier auch nicht unbedingt zu erwarten, da durch die Beschränkung auf  $\mathcal{A}_i(\ell)$  auch in den Zwischenschritten die Entstehung vieler Skalarprodukte  $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+3}$  und  $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+4}$  in den Endergebnissen für die Kommutatoren und Produkte verhindert wird. Die  $d^{\text{sw}}$ - und  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$ -Kurven sind in  $g_c$ -Richtung leicht gestreckt gegenüber der Kurve ohne Einbeziehung von  $J_3$  und  $J_4$ . Zudem bricht die Beschreibung weniger früh ab. Qualitativ ändert sich aber nichts – die Kurven knicken immer noch ab. Anzumerken ist noch, dass die Verwendung der  $d^{\text{sw}}$ -Methode die Phasengrenze gegenüber  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$  etwas absenkt. Dies ist zwar wünschenswert, allerdings ist dann die Beschreibung für  $J/\omega_0 \rightarrow 0$  nicht mehr ganz so gut. Man sieht dies besser in den halblogarithmischen Plots in Anhang D. Dort sind noch einmal alle Phasendiagramme zusammengefasst. Die  $\alpha^{\text{sw}}$ -Kurve ähnelt im Verlauf eher der in führender Ordnung  $J/\omega$  und  $g/\omega$ , allerdings wird die kritische Kopplung noch stärker überschätzt.



**Abbildung 22:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$  mit modifizierten Flussgleichungen und Einbeziehung von  $J_3$  und  $J_4$  mittels linearer Spinwellentheorie.

Abbildung 22 zeigt die Resultate der Spinwellenrechnung für die modifizierten Flussgleichungen. Auch hier kann eine Verlängerung der Kurven erreicht werden. Zudem wird der Wendepunkt, den es in der reinen Beschreibung über  $J_1$  und  $J_2$  gibt, unterdrückt. Diese Unterdrückung ist allerdings zu stark, sodass es wieder zu einem Abknicken der Kurven kommt. Für die Relation von  $d^{\text{sw}}$  zu  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$  gilt das oben Gesagte.

Für die Flussgleichungen mit vollem Spinanteil gibt Abbildung 23 die Ergebnisse der Berücksichtigung von  $J_3$  und  $J_4$  wieder. Das Ausreißen der Kurve zu großen  $g_c$ -Werten wird durch die  $\alpha^{\text{sw}}$ -Methode bis  $J/\omega_0 \approx 0.45$  und durch die beiden Differenziationsansätze  $d^{\text{sw}}$  und  $d_{\text{simpl}}^{\text{sw}}$  vollkommen verhindert. Durch die Betrachtung der vollen Spinanteile entstehen sehr viele längerreichweitige Kopplungen, die – wie die Kurven  $\alpha^{\text{sw}}$  und  $d^{\text{sw}}$  zeigen – über die lineare Spinwellentheorie sinnvoll in die Beschreibung aufgenommen werden können. Die beiden Kurven liegen für mittlere  $J/\omega_0$  näher an den Ergebnissen der Flussgleichungen in führender Ordnung  $J/\omega_0$  und  $g/\omega_0$  als an den DMRG-Daten. Das Überschätzen der kritischen Kopplung  $g_c$  ist für die Flussgleichungen mit vollem Spinanteil durch keine der Spinwellenmethoden zu verhindern. Die  $d^{\text{sw}}$ -Beschreibung liefert im Intervall  $J/\omega_0 \in [0.01, 0.06]$  Werte für  $g_c$ , die um ca.  $0.01/\omega_0$  unter den DMRG-Resultaten liegen (vgl.



**Abbildung 23:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$  mit dem vollem Spinanteil in den Flussgleichungen und Einbeziehung von  $J_3$  und  $J_4$  mittels linearer Spinwellentheorie

dazu wieder die halblogarithmischen Plots in Anhang D).

**Fazit.** Die Ergebnisse dieses Abschnitts haben die Bedeutung der längerreichweitigen Spinterme für die Beschreibung des Phasenübergangs von der lückenlosen in die lückenbehaftete Phase gezeigt.

Die Berücksichtigung von Skalarprodukten zwischen dritt- und viertnächsten Nachbarn über die zusätzlichen Kopplungskonstanten  $J_3$  und  $J_4$  mittels linearer Spinwellentheorie bringt für die modifizierten Flussgleichungen eher eine Verschlechterung mit sich. Hier scheint sich die Mischform, die Matrix  $\mathbf{M}$  in den Flussgleichungen für  $\nu(\ell)$  aber nicht in denen für  $\omega(\ell)$ ,  $\mu(\ell)$  und die  $J_i(\ell)$  zu benutzen, als Nachteil herauszustellen.

Die Einbeziehung der Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  verbessert die Ergebnisse der Flussgleichungen mit vollem Spinanteil. Mit der  $d^{\text{sw}}$ - bzw. der  $\alpha^{\text{sw}}$ -Methode aus der Spinwellenrechnung kommt man zu brauchbaren Ergebnissen im Bereich bis zu  $J/\omega \approx 0.6$  bzw. bis zu  $J/\omega \approx 0.45$ . Prinzipiell überschätzten aber beide Verfahren die kritische Kopplung  $g_c$  (mit der Ausnahme von  $d^{\text{sw}}$  für  $J/\omega_0 \in [0.01, 0.06]$ , s. o.).

Es gelingt keiner dieser Modifikationen im Bereich  $0 < J/\omega_0 < 0.3$  an die Qualität der Flussgleichungsergebnisse zu gelangen, die man unter kon-

sequenter Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  und der Vernachlässigung von längerreichweitigen Kopplungen erhält.

Geht man im Ansatz für den Ankopplungsoperator bis zur Ordnung  $\mathcal{L}^2$ , entstehen bereits in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  selbst zusätzliche langreichweitige Beiträge. Beschränkt man sich jetzt auf die unmodifizierten Flussgleichungen, kann man sich davon eine ausgewogenere Bilanz von kurz- und langreichweitigen Spintermen versprechen, die ober- und unterhalb von  $J/\omega_0 \approx 0.3$  eine angemessene Beschreibung des Phasenübergangs liefert. Die Erweiterung des Operatorraumes wird im nächsten Abschnitt durchgeführt.

## 4.5 Ordnung $\mathcal{L}^2$ ( $\mathbf{M}_{24}$ )

### 4.5.1 Vorbereitungen

In Kapitel 4.4 wurden die Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  aufgestellt und gelöst. Geht man in der Entwicklung der Exponentialfunktion (4.24) bis zur Ordnung  $\mathcal{L}^2$ , muss der Ansatz für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  um alle Terme erweitert werden, die durch zweimaliges Kommutieren des reinen Spinanteils  $\mathcal{H}_S$  mit dem Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i$  für  $\ell = 0$  entstehen. Damit setzt sich  $\mathcal{A}_i(\ell)$  aus den Beiträgen

$$\mathcal{A}_i(0) \quad \text{und} \quad \mathcal{L}\mathcal{A}_i(0) \quad \text{und} \quad \mathcal{L}^2\mathcal{A}_i(0) \quad (4.100)$$

zusammen. In Anhang C.1 sind alle Anteile des Operatorraumes in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  zusammengestellt. Zu den bereits in Ordnung  $\mathcal{L}$  vorhandenen kommen fünf Skalarproduktterme und 14 Viererspinterme hinzu. Bei den zusätzlichen Skalarprodukten  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n$  kommen Abstände  $|m - n| = 1, 2, 3$  vor. Zudem enthalten drei Skalarproduktterme in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  keinen Spin am Gitterplatz  $i$ , sondern sind verschoben oder wechselwirken über den Platz  $i$  hinweg. Die Viererspinterme werden als Skalarprodukte von Kreuzprodukten geschrieben, da sie so am einfachsten aus den computeralgebraischen Rechnungen zu extrahieren sind. Im Viererspinanteil aus  $\mathcal{A}_i(\ell)$  kommen Gitterplätze bis zu  $i \pm 4$  vor. Die Operatoren  $\mathcal{T}_3^c$ ,  $\mathcal{T}_{12}^c$  und  $\mathcal{T}_{13}^c$  beschreiben eine Wechselwirkung zwischen vier Spins, von denen die äußersten fünf Plätze voneinander entfernt liegen.

Das Aufstellen der Flussgleichungen erfordert die Bestimmung der Matrizen  $\mathbf{M}$  und  $\mathbf{N}$ . Die Matrix  $\mathbf{M}$  gibt die Wirkung von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i(\ell)$  an und ist in Anhang C.2 wiedergegeben. Aus ihr kann die Matrix  $\mathbf{N}$  abgeleitet werden, indem die Vorzeichen, die bei Anwenden des Liouville-Operators auf antihermitesche Operatoren aus  $\mathcal{A}_i(\ell)$  zusätzlich entstehen, in  $\mathbf{N}$  aufgenommen werden.  $\mathbf{N}$  gibt dann die Wirkung von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}_i^\dagger(\ell)$  an.

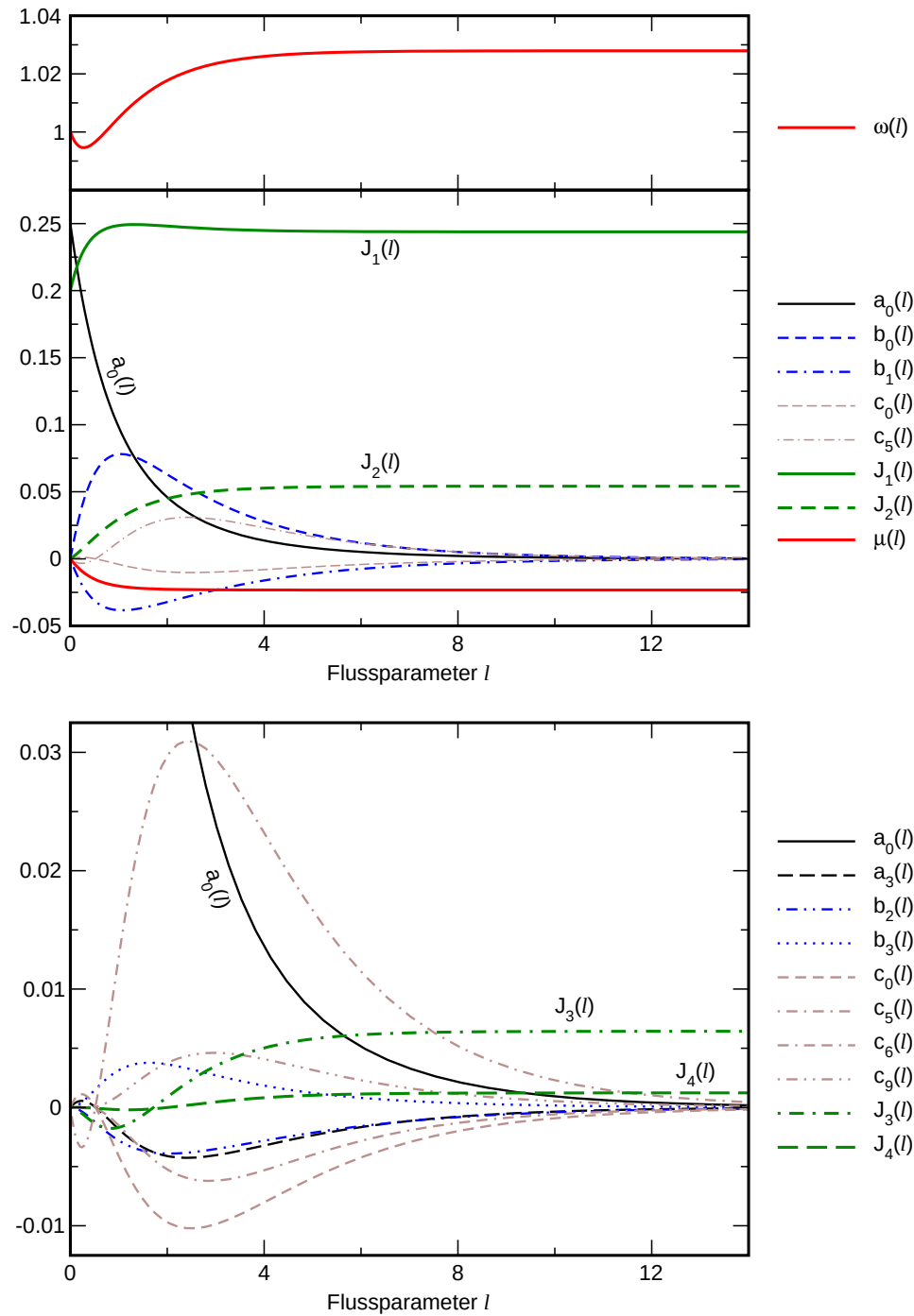
Mit der Erweiterung des Operatorunterraumes ist natürlich auch ein größerer Satz von flussabhängigen Parametern verbunden. Insgesamt sind 30 gekoppelte nichtlineare Differenzialgleichungen zu lösen, wobei die Flussgleichungen für  $J_3$  und  $J_4$  schon dazugezählt sind. Die längerreichweitigen Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  können – wie in den Rechnungen in Ordnung  $\mathcal{L}$  – über die drei in Kapitel 4.4.5 vorgestellten Methoden einbezogen werden. In Ordnung  $\mathcal{L}^2$  werden die Modifikationen der Flussgleichungen, die die Systematik in der Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  betreffen, nicht durchgeführt. Das liegt einerseits daran, dass man in der Ordnung  $\mathcal{L}^2$  auch bereits bei konsequenter Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  an die Grenzen dessen gerät, was mit dem Computeralgebrasystem **Reduce** noch machbar ist. Andererseits hat das letzte Kapitel, in dem die Ergebnisse der modifizierten Flussgleichungen und der Flussgleichungen mit vollem Spinanteil in Ordnung  $\mathcal{L}$  vorgestellt wurden, gezeigt, dass diese beiden Modifikationen die Qualität der Resultate bei kleinen  $J/\omega_0$  verringern.

#### 4.5.2 Ergebnisse

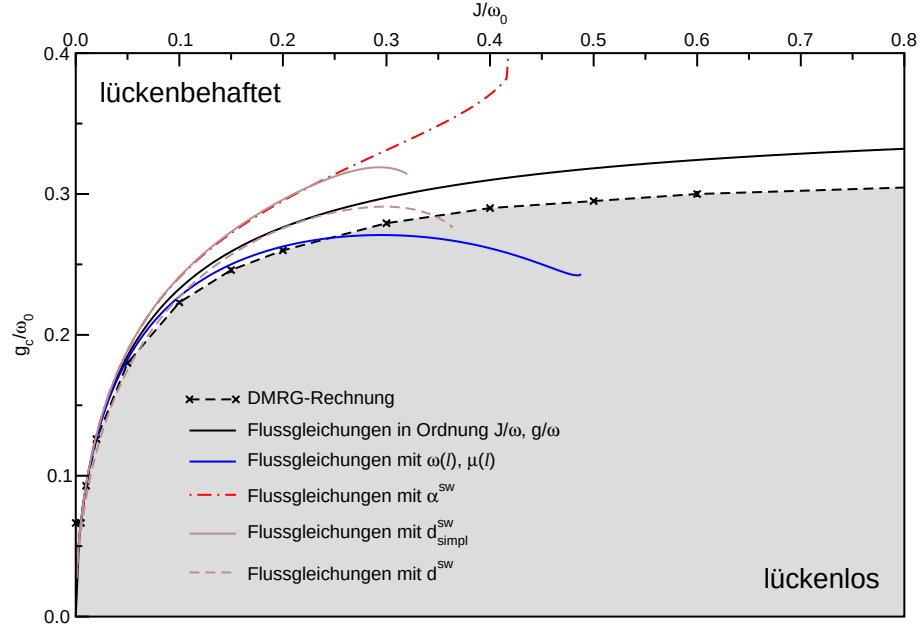
Nach Aufstellen der Flussgleichungen für die 24 Spin-Phonon-Kopplungskonstanten ( $a_i, b_i, c_i$ ), die vier Austauschkopplungen ( $J_i$ ), die Phononfrequenz  $\omega(\ell)$  und für  $\mu(\ell)$  werden die Differenzialgleichungen über die Runge-Kutta-Routine gelöst. Abbildung 24 gibt für die Anfangswerte  $J/\omega_0 = 0.2$  und  $g/\omega_0 = 0.25$  den Fluss der Koeffizienten wieder. Man sieht sehr schön, dass alle Koeffizienten des Ankopplungsoperators  $\mathcal{A}_i(\ell)$  wegfließen. Die  $a_i(\ell)$  (Skalarprodukte) und  $c_i(\ell)$  (Viererspininterme), die nicht in Abbildung 24 eingetragen wurden, geben nur kleine Beiträge zum Fluss, dürfen aber aufgrund ihrer Anzahl keinesfalls vernachlässigt werden. Die effektiven Austauschkopplungen  $J_3$  und  $J_4$  sind nicht so groß wie bei den modifizierten Flussgleichungen, die nur in Ordnung  $\mathcal{L}$  benutzt wurden. Es verhalten sich  $J_1 : J_2 : J_3 : J_4$  ungefähr wie 200 : 40 : 5 : 1. Ein „Hartwerden“ des Phonons beim Übergang zum effektiven Modell ist wie bereits in Ordnung  $\mathcal{L}$  zu beobachten.

Abbildung 25 zeigt das Phasendiagramm, was man in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  über die Flussgleichungen und die drei Modifikationen mittels linearer Spinwellentheorie erhält. Letztere müssen wie schon in Ordnung  $\mathcal{L}$  für die unmodifizierten Flussgleichungen als zu unsystematisch verworfen werden. Bei Benutzung der Matrix  $\mathbf{M}$  in allen Zwischenschritten fallen bereits zu viele längerreichweitige Terme weg, sodass die entstehenden Flüsse für  $J_3$  und  $J_4$  unrealistisch sind. Aber auch das Ergebnis der Flussgleichungen ohne Berücksichtigung von  $J_3$  und  $J_4$  ist eher enttäuschend. Im Bereich  $J/\omega_0 < 0.2$  werden die DMRG-Daten zwar wie auch schon in Ordnung  $\mathcal{L}$  (vgl. Abbil-





**Abbildung 24:** Fluss der Koeffizienten in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  für  $J_1(0) = J = 0.2$  und  $a(0) = g = 0.25$  (in Einheiten von  $\omega_0$ ). Die nicht eingezeichneten  $a_i$  und  $c_i$  geben nur minimale Beiträge. Man beachte zum Vergleich der Größenordnungen die unterschiedlichen Skalen auf den y-Achsen.

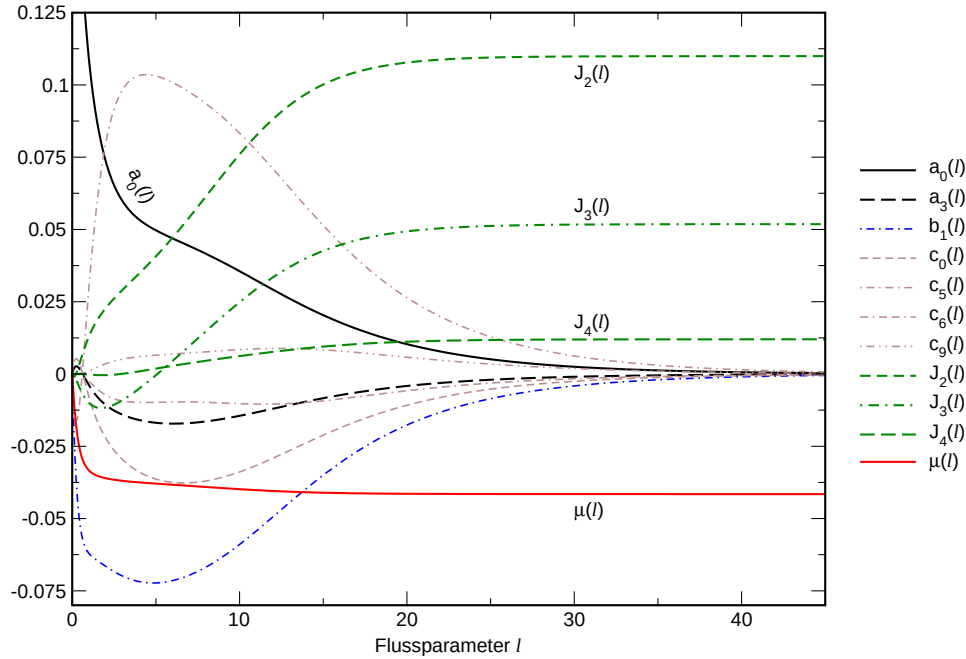


**Abbildung 25:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}^2$

dung 13) beinahe exakt reproduziert. Die Kurve knickt allerdings früher ab und endet bereits bei  $J/\omega_0 \approx 0.5$ .

In Abbildung 26 ist ein Ausschnitt aus dem Flussdiagramm für den Parametersatz  $J/\omega_0 = 0.45$  und  $g/\omega_0 = 0.25$  dargestellt. Es handelt sich also um einen Punkt im Phasendiagramm, wo die Beschreibung durch die Flussgleichungen in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  nicht mehr gut funktioniert. An den Flüssen der gezeigten Koeffizienten kann man bereits sehen, dass das Verhalten der Differenzialgleichungen umgeschlagen ist. Das Verhältnis der Austauschkopplungen zueinander  $J_1 : J_2 : J_3 : J_4$  liegt jetzt ungefähr bei  $40 : 10 : 5 : 1$ . Die Kopplungen  $J_3$  und  $J_4$  haben also im Vergleich zu  $J_1$  und  $J_2$  an Gewicht gewonnen. Die Beiträge durch die Viererspinterme ( $c_i$ -Koeffizienten) sind in dem Bereich mit  $J \geq 0.4$  stärker als in dem in Abbildung 24 gezeigten. Die über die unitäre kontinuierliche Transformation durchgeführte Renormierung der  $\ell$ -abhängigen Koeffizienten ändert sich auch qualitativ. Es gibt in einem Bereich mittlerer  $\ell \approx 2 - 10$  einen zusätzlichen Wendepunkt. Die Transformation gelingt zwar noch, d. h. die Spin-Phonon-Kopplung wird weggedreht, aber die Abbruchbedingung für das Erreichen des Limes  $\ell \rightarrow \infty$  wird für  $J/\omega_0 \rightarrow 0.5$  erst bei immer größeren Werten des Flussparameters  $\ell$  erreicht.

**Fazit.** Die Erweiterung auf einen Operatorunterraum in zweiter Ordnung im Liouville-Operator  $\mathcal{L}$  und die damit verbundene Erhöhung der Anzahl



**Abbildung 26:** Fluss der Koeffizienten in Ordnung  $\mathfrak{L}^2$  für  $J = 0.45$  und  $g = 0.25$  (in Einheiten von  $\omega_0$ )

von Operatoren  $\mathcal{T}_i$  in  $\mathcal{A}_i(\ell)$  von fünf auf 24 hat nicht den erwünschten Erfolg gebracht. Im Bereich  $J/\omega_0 \leq 0.2$  lieferte auch schon die Ordnung  $\mathfrak{L}$  sehr gute Ergebnisse. Die Korrekturen für  $g_c(J)$  liegen dementsprechend für  $J/\omega_0 \in [0, 0.2]$  durch die Berücksichtigung der durch  $\mathfrak{L}^2 \mathcal{A}_i(\ell)(0)$  erzeugten zusätzlichen Operatoren in der Größenordnung  $10^{-5}/\omega_0$ . Dies rechtfertigt im Nachhinein nicht den Aufwand, der mit der Berechnung der umfangreichen Kommutator- und Produktausdrücke verbunden ist, wenn man bedenkt, dass die Kurve in Ordnung  $\mathfrak{L}$  sogar weniger früh abbricht ( $J/\omega_0 \approx 0.8$  statt  $J/\omega_0 \approx 0.5$  in Ordnung  $\mathfrak{L}^2$ ) und auch im Bereich mittlerer  $J/\omega_0 \approx 0.2 - 0.4$  noch ansprechende Ergebnisse liefert.

Eine im gesamten Parameterbereich gute Ergebnisse liefernde Erweiterung der in Referenz [2] in Ordnung  $\frac{g^2}{\omega^2}$  und  $\frac{g^2 J}{\omega^3}$  durchgeführten Flussgleichungsrechnung steht damit noch aus. Es ist interessant zu beobachten, dass auch *Weisse et al.* bei der Berücksichtigung der vierten Ordnung in  $g/\omega$  schlechtere Ergebnisse als *Uhrig* mit der Entwicklung in führender Ordnung erhalten. Auch die in dieser Arbeit durchgeführten Verallgemeinerungen der Flussgleichungsrechnung brachten, obwohl sie im Sinne einer Entwicklung in  $g/\omega$  als systematische Erweiterung von Referenz [2] gesehen werden können, nur für kleine  $J/\omega$  eine Verbesserung. Es ist zu vermuten, dass eine

sehr große Anzahl von Kopplungen  $J_i$  in der Rechnung berücksichtigt werden muss. Dies ist allerdings im Rahmen der hier benutzten Darstellung über die Spinvektoren  $\mathbf{S}_i$  nicht sinnvoll. Bereits in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  war die Berechnung der Mehrfachprodukte und -kommutatoren über die Spinalgebra sehr aufwendig.

#### 4.6 Alternativer Generator: Spin-Boson-Kopplung

In Kapitel 3.2 wurde der in den Arbeiten von *Knetter* und *Uhrig* [48, 49] bzw. *Mielke* [47] eingeführte alternative Generator vorgestellt. Diese Vorgehensweise soll in diesem Abschnitt auf das Spin-Boson-Problem angewendet werden. Der Generator der unitären Transformation wird nicht – wie in der kanonischen wegnerschen Wahl – über den Kommutator des Diagonalanteils mit dem Nichtdiagonalanteil des Hamiltonoperators berechnet, sondern es wird ein anderes Ordnungsprinzip gewählt. Durch Einführung einer Quantenzahl  $\mathcal{Q}$  und der Wahl  $\eta = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$  wird ein effektiver Hamiltonoperator hergeleitet, für den  $\mathcal{Q}$  eine Erhaltungsgröße ist. In dem Fall der Spin-Phonon-Kette bietet sich damit folgende Wahl an

$$\eta = [\mathcal{Q}, \mathcal{H}] \quad \text{mit} \quad \mathcal{Q} = \sum_i b_i^\dagger b_i . \quad (4.101)$$

Tatsächlich wäre  $\eta_{ij} = (q_i - q_j)h_{ij}$  in einer Eigenbasis von  $\mathcal{Q}$  die beste Wahl [vgl. Gleichung (3.26)]. Da aber hier nur Änderungen in der Phononenzahl um  $\Delta\mathcal{Q} = (q_i - q_j) = \pm 1, 0$  auftreten, reicht es aus, (4.101) zu betrachten. Der infinitesimale Generator  $\eta$  ist dann

$$\eta = \sum_i (\mathcal{A}_i b_i^\dagger - \mathcal{A}_i^\dagger b_i) . \quad (4.102)$$

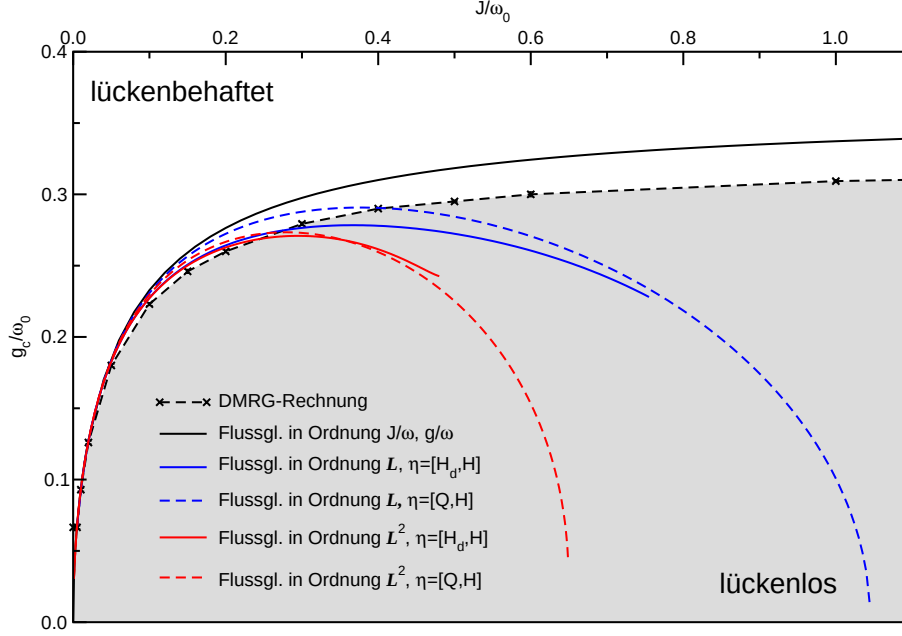
Als nächstes müssen die Flussgleichungen für die  $\ell$ -abhängigen Parameter gefunden werden, d. h. es muss

$$\frac{d\mathcal{H}}{d\ell} = [\eta, \mathcal{H}] = [\eta, \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B^{(\omega)} + \mathcal{H}_{SB}] \quad (4.103)$$

ausgewertet werden. Es ist nicht nötig, den in Kapitel 4.1 eingeführten Term  $\mathcal{H}_B^{(\mu)}$  zu berücksichtigen, da der Kommutator  $[\eta, \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B^{(\omega)} + \mathcal{H}_{SB}]$  keine nichtphononenzahlerhaltenden Beiträge des Typs  $b^\dagger b^\dagger$  bzw.  $bb$  erzeugt, sodass  $\mu \equiv 0$  ist. Die Auswertung des Kommutators ergibt

$$[\eta, \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B^{(\omega)}] = -(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i b_i^\dagger - (-\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i^\dagger b_i \quad (4.104)$$

$$[\eta, \mathcal{H}_{SB}] = 2 \sum_{ij} b_i^\dagger b_j [\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j^\dagger] - 2 \sum_i \mathcal{A}_i^\dagger \mathcal{A}_i . \quad (4.105)$$



**Abbildung 27:** Phasendiagramm in Ordnung  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{L}^2$ . Zum Vergleich sind neben den mittels des alternativen Generators  $[Q, \mathcal{H}]$  errechneten Phasengrenzlinien (gestrichelt) auch die Ergebnisse gezeigt, die mit der kanonischen wegnerschen Wahl von  $\eta$  erhalten wurden (durchgezogene Linien).

Damit können die Flussgleichungen für den Kopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$  und für die Phononfrequenz  $\omega(\ell)$

$$\frac{d\mathcal{A}_i}{d\ell} = -(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i \quad (4.106)$$

$$\frac{d\omega}{d\ell} = 2\langle [\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_i^\dagger] \rangle \quad (4.107)$$

aufgestellt werden. Da bei  $T = 0$  der Erwartungswert  $\langle b^\dagger b \rangle$  verschwindet, reicht es aus, für die Flussgleichungen für  $J_1$  und  $J_2$  den Beitrag

$$-2 \sum_i \mathcal{A}_i^\dagger \mathcal{A}_i \quad (4.108)$$

aus  $\frac{d\mathcal{H}}{d\ell}$  zu analysieren.

Die Struktur der Flussgleichungen, die man auf diese Art und Weise erhält, ist wesentlich einfacher als die in Abschnitt 4.2 über die wegnersche Kommutatorwahl gefundene. Der Liouville-Operator tritt nur in der Flussgleichung für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  auf, und das auch nur linear. Da die Differenzialgleichung für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  den adjungierten Operator  $\mathcal{A}_i^\dagger(\ell)$  nicht enthält, ist es auch nicht nötig, die Matrix  $\mathbf{N}$  zu benutzen. Ein Term  $\mathcal{H}_B^{(u)}$  entsteht erst gar nicht.

Zur Beschränkung des Operatorunterraums für  $\mathcal{A}_i(\ell)$  wurden die in Kapitel 4.2 vorgestellten Ansätze in Ordnung  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{L}^2$  verwendet. Abbildung 27 zeigt die Resultate in Form des Phasendiagramms, in dem die kritische Spin-Phonon-Kopplung  $g_c$  in Abhängigkeit von  $J = J_1(\ell = 0)$  in Einheiten von  $\omega_0$  aufgetragen ist. Das bereits bei den mittels des wegnerschen Generators errechneten Phasendiagrammen beobachtete Abknicken der Phasengrenzlinie in Bereichen mittlerer  $J/\omega_0$  bleibt erhalten. In Ordnung  $\mathcal{L}$  liegt die  $[\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$ -Kurve für kleine  $J/\omega_0$  fast auf dem Resultat in führender Ordnung in  $J/\omega_0$  und  $g/\omega_0$  aus Referenz [2]. In Ordnung  $\mathcal{L}$  liefert die (kompliziertere) Rechnung mittels des kanonischen Generators die besseren Resultate. Erweitert man den Operatorraum auf die nächste Ordnung in  $\mathcal{L}$  unterscheiden sich die Ergebnisse der beiden verschiedenen Generatoren allerdings nur wenig. (Die größere Reichweite der  $[\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$ -Kurven ist insofern keine echte Verbesserung, als sie nur zusätzliche  $g_c(J)$ -Werte *nach* Abknicken der Kurve liefert.) Es ist bemerkenswert, dass man mit dem Generator  $[\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$  und den wesentlich einfacheren Flussgleichungen (4.106–4.108) in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  für kleine  $J/\omega_0$  ähnlich gute Resultate wie mit dem wegnerschen Zugang erhalten kann.

Das Abknicken der Phasengrenzlinien für mittlere  $J/\omega_0$  und das leichte Überschätzen der kritischen Spin-Phonon-Kopplung  $g_c(J)$  für kleine  $J/\omega_0$  stellt sich auch bei Wechsel des Generators als entscheidende Schwäche der Beschreibung dar. In Ordnung  $\mathcal{L}^2$  können zumindest für kleine  $J/\omega_0$  mit dem in diesem Abschnitt angewendeten einfacheren Generator ansprechende Resultate hergeleitet werden. Dennoch wird die Schlussfolgerung erhärtet, dass die Abbildung der Spin-Phonon-Kette auf ein möglichst *lokales* effektives Spin-Modell nicht der richtige Weg zu sein scheint.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde eine an Phononen gekoppelte antiferromagnetische spinisotrope  $S = 1/2$ -Heisenbergkette über die Flussgleichungsmethode auf ein effektives Spinmodell abgebildet. Durch eine Folge kontinuierlicher unitärer Transformationen konnte das Spinsystem von der phononischen Umgebung weitgehend entkoppelt werden. Der Flussparameter  $\ell$  bezeichnete dabei den Status der Transformation. Für  $\ell = 0$  war  $\mathcal{H}(\ell)$  der untransformierte Hamiltonoperator und im Limes  $\ell \rightarrow \infty$  ging  $\mathcal{H}(\ell)$  über in den effektiven Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_{S\infty} + \mathcal{H}_{B\infty} = \mathcal{H}_S^{\text{eff}} + \mathcal{H}_B^{\text{eff}} ,$$

in dem die Spin-Phonon-Kopplung weggedreht ist und in den effektiven Anteilen implizit enthalten ist. Dies wurde durch die mit „Fluss der Koeffizienten“ bezeichneten Abbildungen illustriert. Alle Parameter des Ankopplungsoperators  $\mathcal{A}_i(\ell)$  verschwanden im Limes  $\ell \rightarrow \infty$ . Die verbleibenden  $\ell$ -abhängigen Größen, insbesondere die Austauschkopplungen des Spinsystems, wurden durch diese Prozedur renormiert. Diese effektiven Kopplungen sind das Hauptergebnis der Arbeit. Es zeigte sich, dass durch die Spin-Phonon-Kopplung im effektiven Modell längerreichweitige Spin-Kopplungen induziert werden, die im Ausgangshamiltonoperator nicht enthalten waren. Auf diese Weise entstand eine Übernächstnachbar-Wechselwirkung  $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}$ , die die magnetische Wechselwirkung nächster Nachbarn frustriert. Über die effektive Frustration  $\alpha_{\text{eff}} = J_{2\infty}/J_{1\infty}$  konnten durch Vergleich mit der für das  $J_1$ - $J_2$ -Modell bekannten kritischen Frustration  $\alpha_c \approx 0.24$  Phasendiagramme bestimmt werden, die den Übergang von einer lückenlosen Phase in eine lückenbehaftete Phase beschreiben. Dazu wurde für festes  $J = J_1(\ell = 0)$  die kritische Spin-Phonon-Kopplung  $g_c$  gesucht, die im effektiven Modell die kritische Frustration  $\alpha_c$  zur Folge hat.

Für eine lokale Kopplung  $\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} - \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle)$  konnte in führender Ordnung in  $J/\omega$  und  $g/\omega$  ein effektives Spinmodell hergeleitet werden. Das resultierende Phasendiagramm wurde mit Ergebnissen aus Referenz [54] verglichen, wo eine Störungsrechnung in vierter Ordnung  $J/\omega$  und  $g/\omega$  durchgeführt wurde. Dabei stellten sich die Flussgleichungsergebnisse als zuverlässiger heraus, da sie für  $J/\omega \rightarrow \infty$  einen endlichen Wert vorhersagen. Die Beschreibung aus Referenz [54] brach bei endlichem  $J/\omega$  ab und zeigte eine Tendenz zu einem wachsenden Verhältnis von  $g_c/\omega$  für große  $J/\omega$ . Die Frage nach dem Wert für die kritische Kopplung  $g_c$  bei  $J = 0$  konnte nicht eindeutig geklärt werden.

Alle übrigen Berechnungen in dieser Arbeit wurden mit einer Differenzkopplung  $\mathcal{A}_i(0) = g(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i-1})$  durchgeführt. Die Flussgleichungsergebnisse in führender Ordnung in  $J/\omega$  und  $g/\omega$  [2] lieferten eine gute Abschätzung, wie der Vergleich mit den DMRG-Daten zeigte. Die in dieser Arbeit vorgenommenen Erweiterungen führten im Bereich kleiner Kopplungen  $J/\omega \leq 0.2$  zu einer hervorragenden Übereinstimmung mit den DMRG-Ergebnissen. Es wurden zwei Ansätze für den Operator der Ankopplung  $\mathcal{A}_i(\ell)$  gemacht, die Terme bis zur ersten beziehungsweise zweiten Ordnung im Liouville-Operator  $\mathcal{L} = [\mathcal{H}_S, \cdot]$  einschlossen. In Ordnung  $\mathcal{L}$  wurden zwei Modifikationen der Flussgleichungen durchgeführt, die zusätzliche Zwischenterme zulassen. Zudem wurden über lineare Spinwellentheorie längerreichweitige Beiträge  $J_3\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+3}$  und  $J_4\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+4}$  einbezogen.

Die Erweiterung der Störungsrechnung in niedrigster Ordnung stellte sich als schwierig heraus. Keine der eben aufgezählten Varianten lieferte im gesamten Parameterbereich Resultate, die denen der DMRG-Rechnungen entsprachen. In Ordnung  $\mathcal{L}$  führten die modifizierten Flussgleichungen ohne  $J_3$  und  $J_4$  bzw. die Flussgleichungen mit vollem Spinanteil mit der  $d^{\text{sw}}$ -Methode aus der Spinwellenrechnung zu brauchbaren Ergebnissen im Bereich bis zu  $J/\omega \approx 0.4$  bzw. bis zu  $J/\omega \approx 0.6$ . Prinzipiell überschätzten aber beide Verfahren die kritische Kopplung  $g_c$ .

In Kapitel 3.2 wurde ein alternativer Generator vorgestellt, der durch  $[\mathcal{Q}, \mathcal{H}]$  mit einer einzuführenden Quantenzahl  $\mathcal{Q}$  bestimmt wird.  $\mathcal{Q}$  ist dann eine Erhaltungsgröße des effektiven Hamiltonoperators  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ . Diese Methode wurde in 4.6 auf das Spin-Boson-Problem angewendet. Es zeigte sich, dass die so hergeleiteten Flussgleichungen eine einfachere Struktur als die über den wegnerschen Zugang berechneten haben. Dennoch konnte in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  ein zur kanonischen  $\mathcal{L}^2$ -Rechnung beinahe identisches Phasendiagramm hergeleitet werden.

Es wurde gezeigt, dass der Einfluss längerreichweitiger Beiträge groß ist und dass diese das Phasendiagramm entscheidend beeinflussen. Es stellt sich die Frage, wie längerreichweitige Wechselwirkungen so systematisch in die Theorie eingebunden werden können, dass eine Beschreibung des Phasenübergangs für große Parameterbereiche möglich ist. Eine Erweiterung der hier durchgeführten Rechnung auf noch höhere Ordnungen in  $\mathcal{L}$  oder ähnliche Modifikationen sind sicherlich nicht praktikabel, da sich die Berechnung der Mehrfachprodukte und -kommutatoren über die Spinalgebra als sehr aufwändig herausstellte. Eine geeignetes Verfahren könnte sein, die Spinoperatoren auf Fermionen oder Bosonen abzubilden und das Modell vom Orts- in den Impulsraum zu transformieren. Dies hätte den Vorteil einer wesentlich handlicheren (Anti)Kommutatoralgebra und einer wohldefinierten Normalordnung für die auftretenden Operatoren.



Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden alle Rechnungen bei  $T = 0$  durchgeführt. Es wäre wünschenswert, dies – zunächst für kleine  $J/\omega$  – auf endliche Temperaturen zu verallgemeinern. Damit könnte dann der Einfluss der Spin-Boson-Kopplung auf die Suszeptibilität untersucht werden (vgl. die über Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen erhaltenen Resultate aus den Referenzen [55, 58]). In die Hochtemperaturentwicklungen aus Referenz [59] könnten die temperaturabhängigen effektiven Kopplungen direkt eingesetzt werden. Durch Anpassung an experimentelle Daten (z. B. für die spezifische Wärme oder die Suszeptibilität) ließen sich dann genaue Werte für Modellparameter (z. B. die Frustration) bestimmen.



## A Allgemeines

### A.1 Kommutator $[\eta, \mathcal{H}]$

Mit den Abkürzungen

$$\eta := \eta^{(1)} + \eta^{(2)} \quad (\text{A.1})$$

$$\eta^{(1)} := \sum_i \left\{ (\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i b_i^\dagger + (\mathcal{L} - \omega) \mathcal{A}_i^\dagger b_i \right\} \quad (\text{A.2})$$

$$\eta^{(2)} := -\mu \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger b_i^\dagger - \mathcal{A}_i b_i \right\} \quad (\text{A.3})$$

findet man für die Anteile von  $[\eta, \mathcal{H}]$ :

$$[\eta^{(1)}, \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B^{(\omega)}] = - \sum_i \left\{ (\mathcal{L} + \omega)^2 \mathcal{A}_i b_i^\dagger + (\mathcal{L} - \omega)^2 \mathcal{A}_i^\dagger b_i \right\} \quad (\text{A.4})$$

$$[\eta^{(1)}, \mathcal{H}_B^{(\mu)}] = -\mu \sum_i \left\{ (\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i b_i + (-\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i^\dagger b_i^\dagger \right\} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} [\eta^{(1)}, \mathcal{H}_{SB}] &= \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j^\dagger] b_i^\dagger b_j \right. \\ &\quad \left. + [\mathcal{A}_j, (-\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i^\dagger] b_j^\dagger b_i \right\} \\ &\quad + \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j] b_i^\dagger b_j^\dagger \right. \\ &\quad \left. + [\mathcal{A}_j^\dagger, (-\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i^\dagger] b_i b_j \right\} \\ &\quad - \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger [(\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i] + [(-\mathcal{L} + \omega) \mathcal{A}_i^\dagger] \mathcal{A}_i \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$[\eta^{(2)}, \mathcal{H}_S] = \mu \sum_i \left\{ \mathcal{L} \mathcal{A}_i^\dagger b_i^\dagger - \mathcal{L} \mathcal{A}_i b_i \right\} \quad (\text{A.7})$$

$$[\eta^{(2)}, \mathcal{H}_B^{(\omega)}] = \mu \omega \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger b_i^\dagger + \mathcal{A}_i b_i \right\} \quad (\text{A.8})$$

$$[\eta^{(2)}, \mathcal{H}_B^{(\mu)}] = \mu^2 \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger b_i + \mathcal{A}_i b_i^\dagger \right\} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} [\eta^{(2)}, \mathcal{H}_{SB}] &= -\mu \sum_{i,j} \left\{ [\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j] b_i^\dagger b_j^\dagger + [\mathcal{A}_j^\dagger, \mathcal{A}_i] b_i b_j \right. \\ &\quad \left. + [\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j^\dagger] b_i^\dagger b_j + [\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_i] b_j^\dagger b_i \right\} \\ &\quad + \mu \sum_i \left\{ (\mathcal{A}_i^\dagger)^2 + (\mathcal{A}_i)^2 \right\} . \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

## A.2 Allgemeine Differenzialgleichungen

Hier werden zur Übersicht noch einmal die allgemeinen Flussgleichungen zusammengefasst. Für den Ankopplungsoperator  $\mathcal{A}_i(\ell)$ , die Phononfrequenz  $\omega(\ell)$  und  $\mu(\ell)$  ergeben sich

$$\frac{d\mathcal{A}_i}{d\ell} = - \left\{ [(\mathcal{L} + \omega)^2 - \mu^2] \mathcal{A}_i - 2\mu\mathcal{L}\mathcal{A}_i^\dagger \right\} \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{d\omega}{d\ell} = \left\langle \left\langle [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_i^\dagger] + [\mathcal{A}_i, (-\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i^\dagger] \right\rangle_i \right\rangle \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{d\mu}{d\ell} = 2 \left\langle \left\langle [\mathcal{L}\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_i] \right\rangle_i \right\rangle. \quad (\text{A.13})$$

Die mit  $i$  indizierten Klammern  $\langle \cdot \rangle_i$  bezeichnen eine Mittelung über die Kette, während die nichtindizierten  $\langle \cdot \rangle$  für Erwartungswerte stehen. Die Flussgleichungen für die Kopplungskonstanten  $J_1(\ell)$  und  $J_2(\ell)$  erhält man aus dem Kommutator  $[\eta, \mathcal{H}_{\text{SB}}]$  [vgl. Gleichungen (A.6) und (A.10)]

$$\begin{aligned} [\eta, \mathcal{H}_{\text{SB}}] &= \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j^\dagger] b_i^\dagger b_j + \text{h.c.} \right\} \\ &\quad + \sum_{i,j} \left\{ [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_j] b_i^\dagger b_j^\dagger + \text{h.c.} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} &\quad - \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \\ &\quad \rightsquigarrow \sum_i \left\{ [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \langle b^\dagger b \rangle \\ &\quad + \sum_i \left\{ [\mathcal{L}\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger, \mathcal{A}_i] + \text{h.c.} \right\} \langle b^\dagger b^\dagger \rangle \\ &\quad - \sum_i \left\{ \mathcal{A}_i^\dagger [(\mathcal{L} + \omega)\mathcal{A}_i - \mu\mathcal{A}_i^\dagger] + \text{h.c.} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

nach Summation über  $i$  durch Sortieren nach Nächstnachbar- (NN) und Übernächstnachbar-Termen (NNN).

## B Ordnung $\mathcal{L}$

### B.1 Differenzialgleichungen mittels $M_5$

$$\begin{aligned}
\frac{dJ_1(\ell)}{d\ell} = & \left\{ -4a(b_0 - b_1)\omega + [6a^2 + (b_0 - b_1)^2]J_1 \right. \\
& \left. - [6a^2 + (b_0 - b_1)^2 + (b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2 \right\} \langle b^\dagger b \rangle \\
& + \left\{ -a(b_0 - b_1)\mu + [3a^2 - 1/2(b_0 - b_1)^2]J_1 \right. \\
& \left. - [3a^2 - 1/2(b_0 - b_1)^2 \right. \\
& \left. - 1/2(b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2 \right\} (\langle b^\dagger b^\dagger \rangle + \langle bb \rangle) \\
& + [2a(a - b_0 + b_1) + 1/2(b_0^2 + 2b_1^2 + b_2^2 + b_3^2) \\
& + b_0b_3 - b_1b_2]\omega \\
& + [-2a^2 + 1/2(b_0^2 + 2b_1^2 + b_2^2 + b_3^2) - b_0b_3 + b_1b_2]\mu \\
& + 1/2[a(6a - 4b_0 + 4b_1 - b_2 - 2b_3) + (b_0^2 - b_1^2)]J_1 \\
& + 1/2[a(-6a + 5b_0 - 5b_1 + 4b_2 + 5b_3) \\
& - (b_0 - b_1)^2 - (b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2
\end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dJ_2(\ell)}{d\ell} = & \left\{ 4a(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)\omega \right. \\
& \left. - [6a^2 + (b_0 + b_1)^2 + (b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_1 \right. \\
& \left. + [10a^2 + (b_0 - b_1)^2 + (b_2 + b_3)^2 \right. \\
& \left. + 2(b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2 \right\} \langle b^\dagger b \rangle \\
& + \left\{ a[b_0 - b_1 + b_2 + b_3]\mu \right. \\
& \left. + 1/2[-6a^2 + (b_0 - b_1)^2 + (b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_1 \right. \\
& \left. + 1/2[10a^2 - (b_0 - b_1)^2 - (b_2 + b_3)^2 \right. \\
& \left. - 2(b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2 \right\} (\langle b^\dagger b^\dagger \rangle + \langle bb \rangle) \\
& + [a^2 + 2a(b_0 - b_1 + b_2 + b_3) \\
& + 1/4(b_0^2 + 2b_2^2) + 1/2(b_1 - b_3)^2]\omega \\
& + [-a^2 + 1/2(b_1 - b_3)^2 + 1/4(b_0^2 + 2b_2^2)]\mu \\
& + [-3a^2 - a(b_0 - b_1 + 1/2b_3) \\
& - 1/2(b_0 - b_1)^2 - 1/2(b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_1 \\
& + [5a^2 + a(b_0 + b_2) - 3/2a(b_1 - b_3) + 1/2(b_0 - b_1)^2 \\
& + 1/2(b_2 + b_3)^2 + (b_0 - b_1)(b_2 + b_3)]J_2
\end{aligned} \tag{B.2}$$

$$\begin{aligned} \frac{da(\ell)}{d\ell} = & -a(\omega^2 - \mu^2) + 2a(-3J_1^2 + 6J_1J_2 - 5aJ_2^2) \\ & + [(b_0 - b_1)J_1 - (b_0 - b_1 + b_2 + b_3)J_2](\omega + \mu) \end{aligned} \quad (B.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{db_0(\ell)}{d\ell} = & -b_0(\omega^2 - \mu^2) + 4a(J_1 - J_2)(\omega - \mu) - (b_0 - b_1)J_1^2 \\ & + (2b_0 - 2b_1 + b_2 + b_3)J_1J_2 \\ & - (b_0 - b_1 + b_2 + b_3)J_2^2 \end{aligned} \quad (B.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{db_1(\ell)}{d\ell} = & -b_1(\omega^2 - \mu^2) - 2a(J_1 - J_2)(\omega - \mu) + 1/2(b_0 - b_1)J_1^2 \\ & - 1/2(2b_0 - 2b_1 + b_2 + b_3)J_1J_2 \\ & + 1/2(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)J_2^2 \end{aligned} \quad (B.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{db_2(\ell)}{d\ell} = & -b_2(\omega^2 - \mu^2) - 2aJ_2(\omega - \mu) \\ & + 1/2(b_0 - b_1)J_1J_2 - 1/2(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)J_2^2 \end{aligned} \quad (B.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{db_3(\ell)}{d\ell} = & -b_3(\omega^2 - \mu^2) - 2aJ_2(\omega - \mu) \\ & + 1/2(b_0 - b_1)J_1J_2 - 1/2(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)J_2^2 \end{aligned} \quad (B.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\omega(\ell)}{d\ell} = & \left\{ -4a(b_0 - b_1)\omega + [6a^2 + (b_0 - b_1)^2]J_1 \right. \\ & \left. - [6a^2 + (b_0 - b_1)(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)]J_2 \right\} \langle NN \rangle \\ & + \left\{ 4a(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)\omega \right. \\ & \left. - [6a^2 + (b_0 - b_1)(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)]J_1 \right. \\ & \left. + [10a^2 + (b_0 - b_1 + b_2 + b_3)^2]J_2 \right\} \langle NNN \rangle \end{aligned} \quad (B.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mu(\ell)}{d\ell} = & \left\{ -4a(b_0 - b_1)\mu + [6a^2 + b_0^2 - b_1^2]J_1 \right. \\ & \left. - [6a^2 - (b_0 - b_1)(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)]J_2 \right\} \langle NN \rangle \\ & + \left\{ 4a(b_0 - b_1 + b_2 + b_3)\mu \right. \\ & \left. - [6a^2 - (b_0 - b_1 + b_2 + b_3)(b_0 - b_1)]J_1 \right. \\ & \left. + [10a^2 - (b_0 - b_1 + b_2 + b_3)^2]J_2 \right\} \langle NNN \rangle \end{aligned} \quad (B.9)$$

## C Ordnung $\mathcal{L}^2$

### C.1 Operatorraum

Die folgende Operatoren müssen bei der Rechnung in Ordnung  $\mathcal{L}^2$  berücksichtigt werden. Die mit  $\bullet$  gekennzeichneten entstehen durch einmalige Anwendung von  $\mathcal{L}$  auf  $\mathcal{A}(0)$  und spannen den Operatorraum der  $\mathbf{M}_5$ -Beschreibung (in Ordnung  $\mathcal{L}$ ) auf. Durch nochmaliges Anwenden des Liouville-Operators  $\mathcal{L}$  erhält man die zusätzlichen Skalarproduktterme  $\mathcal{T}_{1,\dots,5}^a$  und die Skalarprodukte von Kreuzprodukten  $\mathcal{T}^c$ .

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \mathcal{T}_0^a &:= \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i \\
 \mathcal{T}_1^a &:= \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_{i-2} \cdot \mathbf{S}_i \\
 \mathcal{T}_2^a &:= \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+3} - \mathbf{S}_{i-3} \cdot \mathbf{S}_i \\
 \mathcal{T}_3^a &:= \mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_{i-2} \cdot \mathbf{S}_{i-1} \\
 \mathcal{T}_4^a &:= \mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_{i+3} - \mathbf{S}_{i-3} \cdot \mathbf{S}_{i-1} \\
 \mathcal{T}_5^a &:= \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_{i+2} - \mathbf{S}_{i-2} \cdot \mathbf{S}_{i+1}
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \mathcal{T}_0^b &:= i\mathbf{S}_{i-1} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \bullet \quad \mathcal{T}_1^b &:= i[\mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+2}) + \mathbf{S}_{i-2} \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i)] \\
 \bullet \quad \mathcal{T}_2^b &:= i[\mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+3}) + \mathbf{S}_{i-3} \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i)] \\
 \bullet \quad \mathcal{T}_3^b &:= i[\mathbf{S}_{i-1} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) + \mathbf{S}_{i-2} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1})]
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}_0^c &:= (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_{i+2} \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_{i-2}) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \\
 \mathcal{T}_1^c &:= (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_{i+2} \times \mathbf{S}_{i+4}) - (\mathbf{S}_{i-4} \times \mathbf{S}_{i-2}) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \\
 \mathcal{T}_2^c &:= (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_{i+3} \times \mathbf{S}_{i+4}) - (\mathbf{S}_{i-4} \times \mathbf{S}_{i-3}) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \\
 \mathcal{T}_3^c &:= (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_{i+3} \times \mathbf{S}_{i+5}) - (\mathbf{S}_{i-5} \times \mathbf{S}_{i-3}) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \\
 \mathcal{T}_4^c &:= (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_{i-1}) \cdot (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_i) \\
 \mathcal{T}_5^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+2}) - (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_{i-1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \mathcal{T}_6^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) - (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \mathcal{T}_7^c &:= (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+2}) - (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_{i-1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) \\
 \mathcal{T}_8^c &:= (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) - (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_{i+2}) \\
 \mathcal{T}_9^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_{i-1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \mathcal{T}_{10}^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_{i+1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \mathcal{T}_{11}^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+2} \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_{i-2}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}) \\
 \mathcal{T}_{12}^c &:= (\mathbf{S}_{i-2} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+1} \times \mathbf{S}_{i+3}) - (\mathbf{S}_{i-3} \times \mathbf{S}_{i-1}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+2}) \\
 \mathcal{T}_{13}^c &:= (\mathbf{S}_{i-1} \times \mathbf{S}_i) \cdot (\mathbf{S}_{i+2} \times \mathbf{S}_{i+4}) - (\mathbf{S}_{i-4} \times \mathbf{S}_{i-2}) \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1})
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

C.2 Matrix  $M_{24}$ 

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} & \mathbf{C} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

$$\mathbf{A} := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} J_2 - J_1 & J_1 - J_2 & J_2 & -J_2 \\ 0 & 0 & 0 & -J_1 \\ 0 & 0 & J_1 - J_2 & 0 \\ 0 & J_2 - J_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_1 - J_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

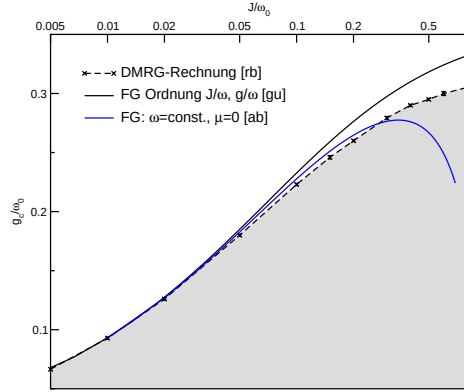
$$\mathbf{B} := \begin{pmatrix} 2(J_2 - J_1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 - J_2 & 0 & 0 & J_2 - J_1 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & J_1 - J_2 & 0 & -J_1 & 0 \\ -J_2 & -J_1 & 0 & 0 & 0 & J_1 - J_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

$$\mathbf{C}^t := \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & J_2 - 2J_1 & J_1 - J_2 & 0 \\ 0 & -2J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2J_1 & 0 \\ 0 & 0 & -2J_2 & 0 \\ 0 & 2J_2 - J_1 & 2J_1 - 2J_2 & 0 \\ 2J_2 - 4J_1 & 2J_1 - J_2 & 0 & J_1 - J_2 \\ 4J_2 - 2J_1 & J_1 - 2J_2 & 0 & 2J_1 - 2J_2 \\ 0 & 2J_2 & 0 & J_2 - 2J_1 \\ 0 & J_2 & 0 & 2J_2 - J_1 \\ -4J_2 & 0 & 2J_1 - J_2 & 0 \\ -2J_2 & 0 & J_1 - 2J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2J_1 \\ 0 & 0 & 2J_2 & -2J_2 \\ 0 & 0 & 0 & -2J_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.7})$$

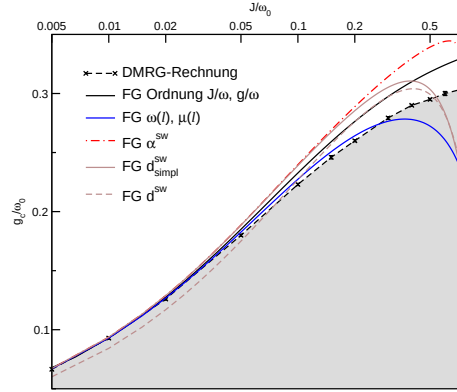
$$\mathbf{D} := \begin{pmatrix} 0 & -J_1 & 0 & 0 \\ 0 & -J_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_1 & 0 \\ 0 & 0 & -J_2 & 0 \\ 0 & J_2 & J_1 - J_2 & 0 \\ -J_1 & J_1 & 0 & 0 \\ J_2 & -J_2 & 0 & J_1 - J_2 \\ 0 & J_2 & 0 & -J_1 \\ 0 & 0 & 0 & J_2 \\ -J_2 & 0 & J_1 & 0 \\ 0 & 0 & -J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_1 \\ 0 & 0 & J_2 & -J_2 \\ 0 & 0 & 0 & -J_2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.8})$$



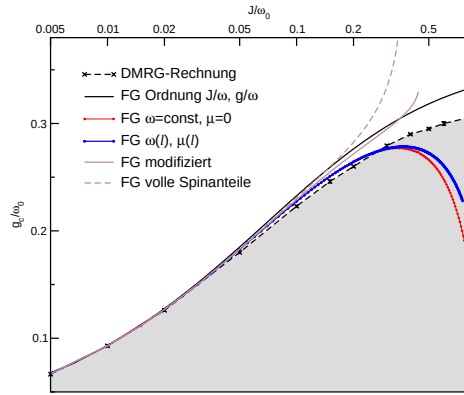
## D Gegenüberstellung der Phasendiagramme



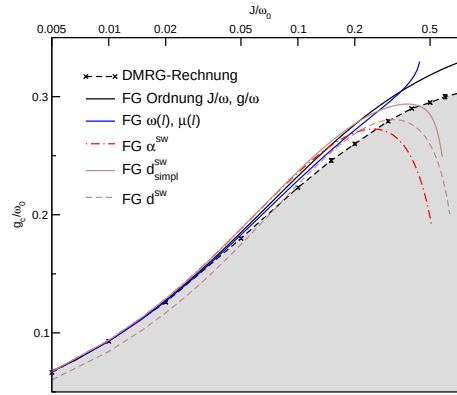
**Abbildung 28:** Andere Arbeiten: *Uh-  
rig* (gu) [2], *Bursill* (rb) [53], *Bühler*  
(ab) [51]



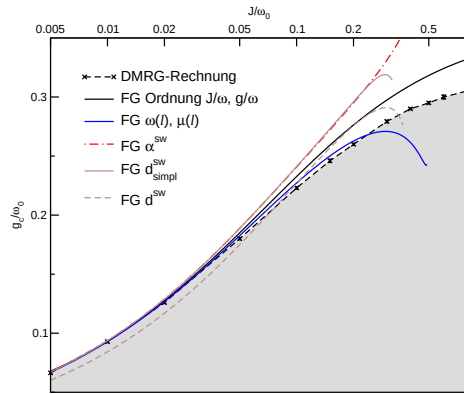
**Abbildung 29:** Ordnung  $\mathcal{L}$ , LSW (Li-  
neare Spinwellentheorie)



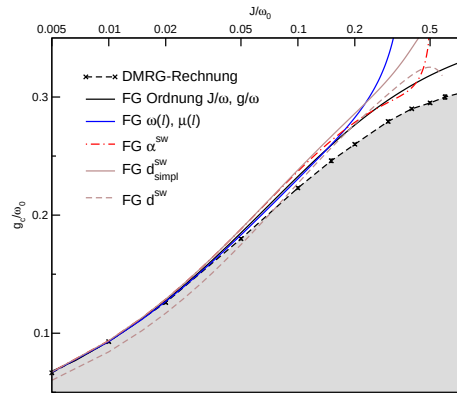
**Abbildung 30:** Ordnung  $\mathcal{L}$



**Abbildung 31:** Ordnung  $\mathcal{L}$ , modifi-  
ziert, LSW



**Abbildung 32:** Ordnung  $\mathcal{L}^2$ , LSW



**Abbildung 33:** Ordnung  $\mathcal{L}$ , voller  
Spinanteil, LSW



## Literatur

- [1] M. Hase, I. Terasaki und K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
- [2] G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **57**, 14004 (1998).
- [3] F. J. Wegner, Ann. Physik **3**, 77 (1994).
- [4] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [5] M. Isobe und Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1178 (1996).
- [6] E. Dagotto und T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996).
- [7] R. Cowley, D. A. Tennant, S. Nagler und T. Perring, J. Mag. Mat. **140**, 1651 (1995).
- [8] A. W. Garrett, S. E. Nagler, D. A. Tennant, B. C. Sales und T. Barnes, Phys. Rev. Lett. **79**, 745 (1997).
- [9] L. Pitaevskii und S. Stringari, J. Low Temp. Phys. **85**, 377 (1991).
- [10] N. D. Mermin und H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [11] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [12] S. Liang, B. Douçot und P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988).
- [13] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [14] A. Klümper, Z. Phys. B **91**, 507 (1993).
- [15] C. K. Majumdar und D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1399 (1969).
- [16] C. K. Majumdar, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 911 (1969).
- [17] P. M. van den Broek, Phys. Lett. **77A**, 261 (1980).
- [18] B. S. Shastry und B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981).
- [19] W. J. Caspers und W. Magnus, Phys. Lett. **88A**, 103 (1982).
- [20] S. Eggert, Phys. Rev. B **54**, 9612 (1996).
- [21] T. Lorenz, *Thermodynamische Eigenschaften des Spin-Peierls-Systems  $\text{CuGeO}_3$*  (Doktorarbeit, Universität zu Köln, 1998).

- [22] J. W. Bray, L. V. Interrante, I. S. Jacobs und J. C. Bonner, in *Extended Linear Chain Compounds*, Herausgeber J. S. Miller (Plenum Press, New York, 1983), Bd. 3, S. 353.
- [23] J. P. Boucher und L. P. Regnault, J. Phys. I France **6**, 1939 (1996).
- [24] M. Braden, G. Wilkendorf, J. Lorenzana, M. Aïn, G. J. McIntyre, M. Behruzi, G. Heger, G. Dhalenne und A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **54**, 1105 (1996).
- [25] W. Geertsma und D. Khomskii, Phys. Rev. B **54**, 3011 (1996).
- [26] D. Khomskii, W. Geertsma und M. Mostovoy, Czech. Journ. of Physics **46**, 3239 (1996).
- [27] M. C. Cross und D. S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979).
- [28] M. Braden, B. Hennion, W. Reichardt, G. Dhalenne und A. Revcolevschi, Phys. Rev. Lett. **80**, 3634 (1998).
- [29] L. G. Caron und S. Moukouri, Phys. Rev. Lett. **76**, 4050 (1996).
- [30] E. Pytte, Phys. Rev. B **10**, 2039 (1974).
- [31] C. Gros und R. Werner, Phys. Rev. B **58**, 14677 (1998).
- [32] J. P. Pouget, L. P. Regnault, M. A. n, B. Hennion, J. P. Renard, P. Veillet, G. Dhalenne und A. Revcolevschi, Phys. Rev. Lett. **72**, 4037 (1994).
- [33] M. Nishi, O. Fujita und J. Akimitsu, Phys. Rev. B **50**, 6508 (1994).
- [34] J. Riera und A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995).
- [35] R. Werner, C. Gros und M. Braden, Phys. Rev. B **59**, 14356 (1999).
- [36] H. Fröhlich, Phys. Roy. Soc. Lond. **A215**, 291 (1952).
- [37] K. W. B. Arnd Huebsch, Matthias Vojta, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 8523 (1999).
- [38] S. K. Kehrein und A. Mielke, Phys. Lett. A **219**, 313 (1996).
- [39] S. K. Kehrein und A. Mielke, Ann. Physik **6**, 90 (1997).
- [40] M. Ragwitz und F. Wegner, Eur. Phys. J. B **8**, 9 (1999).
- [41] P. Lenz und F. Wegner, Nucl. Phys. B **482**, 693 (1996).

- 
- [42] J. Stein, J. Stat. Phys. **88**, 487 (1997).
- [43] S. K. Kehrein, A. Mielke und P. Neu, Z. Phys. B **99**, 269 (1996).
- [44] S. K. Kehrein und A. Mielke, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4259 (1994),  
corrigendum **27**, 5705 (1994).
- [45] S. K. Kehrein und A. Mielke, Ann. of Phys. **252**, 1 (1996).
- [46] <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~statphys/floweq.html>.
- [47] A. Mielke, Eur. Phys. J. B **5**, 605 (1998).
- [48] C. Knetter, *Störungstheorie mit Hilfe von Flußgleichungen angewendet auf dimerisierte Spinmodelle* (Diplomarbeit, Universität zu Köln, 1999).
- [49] C. Knetter und G. S. Uhrig, Eur. Phys. J. B **13**, 209 (2000).
- [50] A. J. Legget, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg und W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [51] A. Bühler, *Hochtemperaturentwicklung für Spinketten und effektive Spinmodelle für Spin-Peierls-Systeme* (Diplomarbeit, Universität zu Köln, 1999).
- [52] S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd ed. (Cambridge University Press, New York, 1992).
- [53] R. J. Bursill, R. H. McKenzie und C. J. Hamer, Phys. Rev. Lett. **83**, 408 (1999).
- [54] A. Weiße, G. Wellein und H. Fehske, Phys. Rev. B **60**, 6566 (1999).
- [55] R. W. Kühne und U. Löw, Phys. Rev. B **60**, 12125 (1999).
- [56] M. Holicki, H. Fehske und R. Werner, **cond-mat**/0006169 (2000).
- [57] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism, Graduate Texts in Contemporary Physics* (Springer, New York, 1994).
- [58] A. W. Sandvik, R. R. P. Singh und D. K. Campbell, Phys. Rev. B **56**, 14510 (1997).
- [59] A. Bühler, N. Elstner und G. S. Uhrig, Eur. Phys. J. B **16**, 475 (2000).



## Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle herzlich bei Prof. Dr. E. Müller-Hartmann und Priv.-Doz. Dr. Götz S. Uhrig für die Vergabe und Betreuung dieser Arbeit bedanken. Die tatkräftige Unterstützung durch Götz Uhrig kann nicht genug hervorgehoben werden.

Weiterer Dank gebührt R. J. Bursill für die Bereitstellung und die zusätzliche Berechnung der DMRG-Daten, A. Weiße und F. Fehske für die prompte Beantwortung einiger Fragen zu ihrem Paper sowie U. Löw für die anregenden Diskussionen zur lokalen Kopplung.

Alexander Bühler danke ich für die vielen hilfreichen Diskussionen und die kritische Durchsicht der Arbeit. Auch den anderen Korrekturlesern Frank Brücher und Cornelius Bähr sei gedankt.

Boris Marić, Robert Schmitz und Tobias Hövelborn möchte ich für die angenehme (und originelle) Atmosphäre in Raum 104 danken.

Meinen Eltern danke ich für die Unterstützung in jeglicher Hinsicht.

## Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbstständig angefertigt wurde und außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel benutzt wurden.

Carsten Raas