

Diplomarbeit
Technische Universität Dortmund
Lehrstuhl für Theoretische Physik I

**Beschreibung von Quantendimermodellen
mittels kontinuierlicher unitärer
Transformationen**

Tim Fischer

Dezember 2007

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 7 |
| 2 | Flussgleichungsmethode | 9 |
| 2.1 | Allgemeine Grundlagen der Flussgleichungen | 9 |
| 2.2 | Der Generator von Wegner | 11 |
| 2.3 | Der Generator von Mielke | 13 |
| 2.4 | Der Generator von Knetter und Uhrig | 15 |
| 2.5 | Erzeugung quasiteilchenerhaltender Hamiltonoperatoren | 17 |
| 2.5.1 | Allgemeine Struktur des effektiven Hamiltonoperators H_{eff} | 18 |
| 2.5.2 | Anordnung der Energieeigenwerte | 18 |
| 2.5.3 | Trunkierungsmöglichkeiten | 19 |
| 2.5.4 | Mögliche Variation des Generators | 20 |
| 2.6 | Anmerkungen zur Implementierung | 20 |
| 2.6.1 | Beschreibung des Programms zur Bestimmung der Flussgleichung | 21 |
| 2.6.2 | Diagonalisierung der effektiven Hamiltonoperatoren | 22 |
| 3 | Vorstellung der betrachteten Modelle | 25 |
| 3.1 | Das antiferromagnetische Heisenberg-Modell | 25 |
| 3.2 | Das Heisenberg-Dimer | 25 |
| 3.3 | Das Heisenberg-Quadrat | 27 |
| 3.4 | Spindarstellung mittels Schwinger-Bosonen | 28 |
| 3.5 | Spindarstellung mittels Fermionen | 29 |
| 4 | Untersuchung der bosonischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers | 31 |
| 4.1 | Formulierung und Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers in bosonischer Darstellung | 32 |
| 4.2 | Molekularfeld-Rechnungen für das bosonische Heisenberg-Dimer | 33 |
| 4.2.1 | Übliche Variante der Molekularfeld-Rechnung | 33 |
| 4.2.2 | Energetische Erhöhung der unphysikalischen Zustände | 36 |
| 4.2.3 | Untersuchung einer alternativen Molekularfeld-Näherung | 37 |
| 4.3 | Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen | 40 |
| 4.3.1 | Ergebnisse und Diskussion für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \text{arsinh}(\frac{1}{2})$ | 45 |
| 4.3.2 | Ergebnisse und Diskussion für beliebige Winkel θ | 50 |
| 4.4 | Zusammenfassung der Ergebnisse | 55 |
| 5 | Untersuchung der fermionischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers | 57 |
| 5.1 | Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers in fermionischer Darstellung | 57 |
| 5.1.1 | Addition zusätzlicher Terme zum Hamiltonoperator | 59 |
| 5.2 | Molekularfeld-Rechnung für das fermionische Heisenberg-Dimer | 59 |
| 5.3 | Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen | 62 |
| 5.3.1 | Ergebnisse und Diskussion für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ | 66 |
| 5.3.2 | Ergebnisse und Diskussion für beliebige Winkel θ | 69 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 5.4 | Zusammenfassung der Ergebnisse | 72 |
| 6 | Untersuchung der fermionischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats | 75 |
| 6.1 | Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats in fermionischer Darstellung | 75 |
| 6.1.1 | Addition zusätzlicher Terme zum Hamiltonoperator | 75 |
| 6.2 | Molekularfeld-Rechnungen für das fermionische Heisenberg-Quadrat | 76 |
| 6.2.1 | Erste selbstkonsistente Lösung | 76 |
| 6.2.2 | Zweite selbstkonsistente Lösung | 80 |
| 6.3 | Verbesserung der Molekularfeld-Rechnungen mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen | 81 |
| 6.3.1 | Ergebnisse im Fall der nicht trunkierten Flussgleichungen | 83 |
| 6.3.2 | Ergebnisse im Fall trunkierter Flussgleichungen bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ | 87 |
| 6.3.3 | Ergebnisse im Fall trunkierter Flussgleichungen für beliebige Werte λ und θ für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ | 91 |
| 6.4 | Zusammenfassung der Ergebnisse | 92 |
| 7 | Zusammenfassung | 93 |
| A | Diagonalisierung bilinearer Hamiltonoperatoren | 95 |
| A.1 | Hermiteische bilineare Formen aus Erzeugern und Vernichtern | 95 |
| A.2 | Diagonalisierung spezieller bilinearer Hamiltonoperatoren | 96 |
| A.2.1 | Bosonische Bogoliubov-Transformation | 97 |
| A.2.2 | Fermionische Bogoliubov-Transformation | 98 |
| A.2.3 | Weitere kanonische Transformation eines fermionischen Hamiltonoperators | 99 |
| B | Erhaltung der z-Komponente des Gesamtspins im Verlauf der kontinuierlichen unitären Transformation | 101 |
| C | Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ | 103 |
| C.1 | Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ | 104 |
| C.2 | Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ | 106 |
| D | Implementierung von Fermionen und Bosonen in Mathematica | 109 |
| | Literaturverzeichnis | 111 |

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-----|--|-----|
| 1.1 | Vereinfachtes schematisches Phasendiagramm eines Hochtemperatur-Supraleiters | 7 |
| 2.1 | Schematische Darstellung der Flussgleichungsmethode | 11 |
| 2.2 | Darstellung von Operatoren in der Programmiersprache C++. | 21 |
| 2.3 | Darstellung eines Terms des Hamiltonoperators in der Programmiersprache C++ | 21 |
| 3.1 | Schematische Darstellung eines Heisenberg-Dimers | 26 |
| 3.2 | Schematische Darstellung eines Heisenberg-Quadrats | 27 |
| 4.1 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U = 0$ | 45 |
| 4.2 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U \neq 0$ | 47 |
| 4.3 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter U bei $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ | 50 |
| 4.4 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 0$ | 51 |
| 4.5 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter θ bei $U = 0$ für $\lambda = 2,8$ und $\lambda = 4,0$ | 52 |
| 4.6 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 1$ | 54 |
| 4.7 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 0,286$ | 55 |
| 5.1 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \frac{\pi}{4}$ (exakt) | 67 |
| 5.2 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \frac{\pi}{4}$ (trunkiert) | 68 |
| 5.3 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Winkel θ bei $\lambda = 0$ | 69 |
| 5.4 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 2$ | 71 |
| 5.5 | Umgebung des stationären Punktes von $h_{0,0}$ bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ für $U = 2$ | 72 |
| 6.1 | Illustration der Molekularfeld-Näherung | 79 |
| 6.2 | Entwicklung der srod während der kontinuierlichen unitären Transformation für die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ | 84 |
| 6.3 | Zusammensetzung der srod während der kontinuierlichen unitären Transformation für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ | 85 |
| 6.4 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter U | 88 |
| 6.5 | Zusammensetzung der srod im trunkierten Fall für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ | 90 |
| 6.6 | Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 3$ und $U = 5$ | 91 |
| D.1 | Implementierung eines bosonischen bzw. fermionischen Kommutators mit Hilfe von MATHEMATICA | 109 |
| D.2 | Implementierung der Kommutatorregeln für zwei Sorten Bosonen oder zwei Sorten Fermionen | 110 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|--|----|
| 3.1 | Eigenzustände des Heisenberg-Dimers | 26 |
| 3.2 | Eigenzustände des Heisenberg-Quadrats | 28 |
| 4.1 | Lösungen des nichtlinearen Gleichungssystems (4.2.41) | 39 |
| 4.2 | Eigenzustände des Hamiltonoperators $H_{b,\lambda,U}$ nach der unitären Transformation | 43 |
| 4.3 | Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums bei festem Winkel θ | 48 |
| 4.4 | Vergleich von $h_{0,0}$ und $E_{2,2}^{\text{ii}}$ mit exakten Werten | 49 |
| 4.5 | Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums bei variablen Winkel θ | 53 |
| 5.1 | Eigenzustände des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}$ nach der unitären Transformation | 65 |
| 5.2 | Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums | 70 |
| 6.1 | Physikalische Eigenwerte des Heisenberg-Quadrats nach der kontinuierlichen unitären Transformation | 87 |
| 6.2 | Eigenwerte des Heisenberg-Quadrats nach der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation | 89 |

1 Einleitung

Im Jahr 1986 entdeckten Bednorz und Müller den ersten Hochtemperatur-Supraleiter Lanthan-Barium-Kupferoxid ($La_{2-x}Ba_xCuO_4$) [BM86] mit einer Sprungtemperatur von etwa 30K. Mittlerweile wurden Materialien gefunden, welche Sprungtemperaturen von bis zu 133K besitzen [SCGO93], und bei sehr großem Druck werden sogar Sprungtemperaturen von über 150K beobachtet [NRTA⁺93]. Diese hohen Sprungtemperaturen sind durch den von Bardeen, Cooper und Schrieffer [BCS57] beschriebenen Mechanismus zur Entstehung einer supraleitenden Phase durch eine von Phononen vermittelte Elektronen-Paarbildung nicht zu erklären.

Anderson machte 1987 die Annahme, dass die in Hochtemperatur-Supraleitern vorhandenen Kupferoxidschichten hauptsächlich für das Auftreten der Supraleitung verantwortlich sind [And87]. Diese Kupferoxidschichten können durch ein Drei-Band-Hubbardmodell beschrieben werden [Eme87]. Werden zusätzlich Effekte der Sauerstoffatome vernachlässigt, so ist eine Beschreibung mittels eines Ein-Band-Hubbardmodells möglich [ZR88]. Im Fall großer Coulomb-Wechselwirkungen lässt sich dieses Ein-Band-Hubbardmodell in führender Ordnung durch das $t-J$ -Modell beschreiben. Das $t-J$ -Modell wiederum reduziert sich bei halber Bandfüllung zum antiferromagnetischen Spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Modell. Es wird angenommen, dass zum Beispiel der undotierte antiferromagnetische Isolator Lanthan-Kupferoxid La_2CuO_4 durch ein zweidimensionales Spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Modell beschrieben werden kann [Man91]. Durch Dotierung kann dann eine supraleitende Phase erreicht werden. Diese Dotierung kann im Rahmen des $t-J$ -Modells beschrieben werden. In Abbildung 1.1 ist schematisch das Phasendiagramm eines Hochtemperatur-Supraleiters dargestellt.

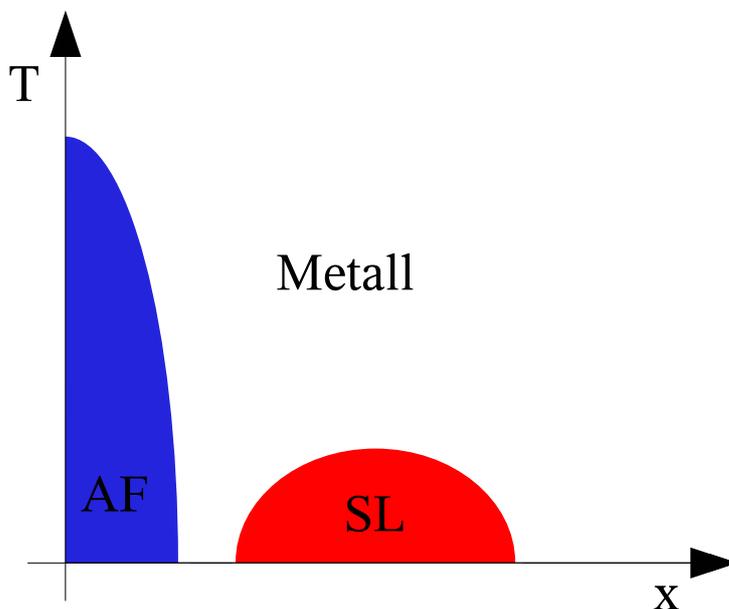


Abbildung 1.1: Vereinfachtes schematisches Phasendiagramm eines Hochtemperatur-Supraleiters. Die Abbildung zeigt die Phasen eines Hochtemperatur-Supraleiters in Abhängigkeit der Temperatur T und der Dotierung x . Die blaue Fläche beschreibt die antiferromagnetische Phase (AF) und die rote Fläche die supraleitende Phase (SL).

Nicht zuletzt wegen diesem Bezug zur Hochtemperatur-Supraleitung sind Heisenberg-Modelle ein Gegenstand der aktuellen Forschung.

Während eine exakte Lösung in einer Dimension mittels des Bethe-Ansatzes existiert [Bet31], wurden bisher noch keine exakten Lösungen in zwei oder mehr Dimensionen gefunden. Neben rein numerischen Rechnungen existiert jedoch ebenfalls eine Reihe an analytischen Näherungsverfahren. Darunter befinden sich zum Beispiel die von Anderson und Kubo entwickelte Spinwellentheorie [And51, Kub52, Ogu60] und die von Affleck und Marston sowie von Arovas und Auerbach verwendeten Molekularfeld-Näherungen [AM88, AA88]. Affleck und Marston verwendeten dabei eine fermionische Darstellung des Heisenberg-Modells, während Arovas und Auerbach eine bosonische Darstellung mittels Schwinger-Bosonen wählten. Die Rechnungen von Arovas und Auerbach liefern insbesondere eine mit fallender Temperatur exponentiell ansteigende Korrelationslänge im zweidimensionalen antiferromagnetischen Heisenberg-Modell, welche auch experimentell beobachtet werden kann [KBSE98].

Ziel dieser Arbeit ist es zu untersuchen, ob es möglich ist derartige Molekularfeld-Rechnungen mit der 1994 von Wegner entwickelten Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen [Weg94] zu verbessern und so eine systematisch verbesserbare Beschreibung von Heisenberg-Modellen zu erlangen. Die Einteilchenzustände in den von Arovas und Auerbach sowie Affleck und Marston durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen sind physikalisch nicht relevant. Daher soll durch die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen insbesondere der Zweiteilchen-Unterraum betrachtet werden, um so ebenfalls physikalische Anregungen zu beschreiben.

Um diese Methode zu testen werden zunächst kleine Heisenberg-Modelle untersucht, deren exakte Lösung zugänglich ist. Dadurch können die erzielten Ergebnisse leicht bewertet werden.

Während Affleck und Marston bzw. Arovas und Auerbach Funktionalintegralmethoden zur Herleitung eines Molekularfeld-Hamiltonoperators verwendeten, werden in der vorliegenden Arbeit die Molekularfeld-Rechnungen in direkter Weise durch Vernachlässigung echter Zweiteilchen-Wechselwirkungen durchgeführt. Für jedes untersuchte Modell werden zwei Schritte durchgeführt:

- a) Durchführung einer Molekularfeld-Rechnung.
- b) Verbesserung der Ergebnisse mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen.

Ein wichtiger Punkt wird dabei die Behandlung der unphysikalischen Zustände spielen, welche durch die Darstellung des Heisenberg-Modells durch Bosonen bzw. Fermionen entstehen.

Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 wird die Flussgleichungsmethode bzw. die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen dargestellt. Insbesondere wird der Knetter-Uhrig-Generator vorgestellt, durch dessen Verwendung es möglich ist teilchenzahlerhaltende effektive Hamiltonoperatoren zu erzeugen.

In Kapitel 3 werden die untersuchten Modelle des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers und des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats beschrieben. Insbesondere werden die exakten Eigenwertspektren angegeben, die im weiteren Verlauf als Referenzwerte dienen.

In Kapitel 4 wird das Heisenberg-Dimer in bosonischer Darstellung untersucht. Dabei wird zunächst eine Molekularfeld-Näherung durchgeführt und anschließend versucht diese mittels der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern.

In Kapitel 5 wird in analoger Weise zum vorherigen Kapitel 4 das Heisenberg-Dimer in fermionischer Darstellung untersucht.

In Kapitel 6 wird versucht die in Kapitel 5 durchgeführten Rechnungen für den Fall des Heisenberg-Quadrats zu verallgemeinern.

In Kapitel 7 werden die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zusammengefasst.

2 Flussgleichungsmethode

In diesem Kapitel wird die Flussgleichungsmethode vorgestellt, welche in Kapitel 4 bis Kapitel 6 dazu verwendet wird, die dort durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen zu verbessern.

Die Flussgleichungsmethode hat bisher in mehreren Gebieten der Festkörperphysik ihre Anwendung gefunden. Unter anderem wurden mit ihrer Hilfe Elektron-Phonon-Kopplung [LW96, RW99], dissipative Quantensysteme [KM97], wechselwirkende Fermionen und das Hubbard-Modell [Ste97, RMHU04], Spin- und Pseudospinmodelle [KM96a, KMN96, KSU03a, SU06] sowie Störstellenprobleme [KM94, KM96b] untersucht. In dem Buch “The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems” [Keh06] werden sowohl die Methode als auch Anwendungen der Flussgleichungsmethode behandelt. Eine gute Übersicht von Veröffentlichungen, bei denen die Flussgleichungsmethode verwendet wurde, findet sich in Referenz [cut].

2.1 Allgemeine Grundlagen der Flussgleichungen

Eines der grundlegenden Probleme der Quantenmechanik ist die Wahl einer angemessenen Basis, in welcher das Problem formuliert wird. Im Idealfall ist man in der Lage eine Basis so zu bestimmen, dass der Hamiltonoperator eine diagonale Gestalt besitzt. Dies ist grundsätzlich für normale Operatoren, also insbesondere für jeden selbstadjungierten Hamiltonoperator H , möglich. Es existiert also eine Basistransformation, dargestellt durch einen unitären Operator U , so dass UHU^\dagger diagonal ist. Eine solche exakte Diagonalisierung ist jedoch aufgrund der Komplexität der Probleme nur in wenigen Spezialfällen möglich. Doch selbst wenn man nicht in der Lage ist, den Hamiltonoperator auf eine diagonale Gestalt zu bringen, so kann man zumindest versuchen, einen effektiven Hamiltonoperator H_{eff} zu bestimmen, so dass das Problem eine möglichst einfache Darstellung besitzt, in der Hoffnung, dass diese Darstellung ausreichend ist, um die physikalischen Eigenschaften des Systems, an welchen man interessiert ist, zu beschreiben und zu verstehen.

Üblicherweise wird dazu der Hamiltonoperator H einer endlichen Anzahl von unitären Transformationen unterzogen

$$H = H_0 \rightarrow H_1 \rightarrow \dots \rightarrow H_i \rightarrow \dots \rightarrow H_n = H_{\text{eff}} \quad (2.1.1)$$

wobei $H_i = U_i H_{i-1} U_i^\dagger$ mit $i = 1, \dots, n$.

Da die Menge der unitären Transformationen, welche auf einem gegebenen Hilbertraum wirken, eine Gruppe bilden, können die einzelnen Transformationen U_i zu einer einzigen unitären Transformation U zusammengefasst werden. Es gilt somit

$$H_{\text{eff}} = U H U^\dagger \quad \text{mit} \quad U := \prod_{i=1}^n U_i \quad . \quad (2.1.2)$$

Unitäre Transformationen lassen Eigenwerte invariant. Die Eigenwerte λ_i von H_{eff} stimmen also mit den Eigenwerten von H überein. Ist $v_{i,\text{eff}}$ ein Eigenvektor von H_{eff} , so sind die Eigenvektoren v_i von H gegeben durch $U^\dagger v_{i,\text{eff}}$.

Das in Gleichung (2.1.2) beschriebene Verfahren zur Bestimmung eines effektiven Hamiltonoperators wurde 1994 von Wegner [Weg94] (und unabhängig davon von Glazek und Wilson [GW93, GW94]) erweitert. Die Idee besteht darin, die endliche Anzahl der nacheinander durchgeführten unitären Transformationen durch eine kontinuierliche unitäre Transformation (continuous unitary transformation, CUT [KU00]) zu ersetzen. Dazu wird ein kontinuierlicher Flussparameter l eingeführt und der Hamiltonoperator als Funktion dieses Parameters aufgefasst

$$H \rightarrow H(l) \quad \text{mit} \quad l \in \mathbb{R} \quad . \quad (2.1.3)$$

2 Flussgleichungsmethode

Der Ausgangshamiltonoperator H wird als $H(0)$ bezeichnet. $H(l)$ wird in Analogie zu (2.1.2) für eine gegebene unitäre Transformation $U(l)$ als

$$H(l) := U(l)H(0)U^\dagger(l) \quad (2.1.4)$$

definiert. Differenziert man nun (2.1.4) nach dem Flussparameter l , so erhält man die sogenannte Flussgleichung

$$\partial_l H(l) = [\eta(l), H(l)] \quad \text{mit} \quad H(0) = H \quad . \quad (2.1.5)$$

Der antihermitesche Generator $\eta(l)$ ist dabei gegeben durch

$$\eta(l) = \frac{\partial U(l)}{\partial l} U^\dagger(l) \quad . \quad (2.1.6)$$

Die unitäre Transformation wird also durch eine Differentialgleichung (DGL) erster Ordnung beschrieben. Multipliziert man die Gleichung (2.1.6) von rechts mit $U(l)$, so erhält man eine Differentialgleichung für die unitäre Transformation $U(l)$.

$$\frac{\partial U(l)}{\partial l} = \eta(l)U(l) \quad \text{mit} \quad U(0) = \mathbb{1} \quad (2.1.7)$$

Die Lösung der Differentialgleichung (2.1.7) ist formal gegeben durch

$$U(l) = \mathcal{L} \exp \left(\int_0^l \eta(l') dl' \right) \quad (2.1.8)$$

mit dem l -Ordnungsoperator \mathcal{L} , welcher die auftretenden Operatoren von rechts nach links mit zunehmendem l ordnet. Aufgrund dieses Operators kann die unitäre Transformation $U(l)$ eine sehr komplizierte Form besitzen, selbst wenn man einen relativ einfachen Generator $\eta(l)$ wählt. An der Darstellung (2.1.8) für $U(l)$ wird deutlich, dass die kontinuierliche unitäre Transformation äquivalent ist zu der Anwendung von unendlich vielen infinitesimalen unitären Transformationen der Form $e^{\eta(l)dl}$.

Bisher hat man das Problem, eine angemessene Basis zu finden, nur umformuliert. Während man in Gleichung (2.1.2) eine passende unitäre Transformation suchte, so muss man in Gleichung (2.1.5) einen geeigneten Generator $\eta(l)$ wählen. Diese kontinuierliche Formulierung des Problems besitzt jedoch zwei entscheidende Vorteile. Zum einen ist die Integration der Flussgleichung (2.1.5) in fast allen Fällen einfacher als das Lösen der diskreten Gleichungen und zum anderen kann die Drehrichtung bzw. die Transformation kontinuierlich angepasst werden.

Ebenfalls kann nun für einen gegebenen Generator $\eta(l)$ anhand der Flussgleichung (2.1.5) direkt die Veränderung des Hamiltonoperators bestimmt werden. Im besten Fall konvergiert das Anfangswertproblem, welches durch die Flussgleichung beschrieben wird, gegen einen stabilen Fixpunkt, in dem der Hamiltonoperator diagonal ist oder zumindest eine einfachere Form als bei $l = 0$ besitzt. Die Flussgleichungsmethode ist in Abbildung 2.1 noch einmal schematisch dargestellt.

Obwohl sich alle bisherigen Betrachtungen auf den Hamiltonoperator H bezogen, ist der Formalismus keineswegs auf diesen beschränkt. Möchte man ebenfalls Aussagen für eine beliebige Observable O treffen, so muss diese Observable lediglich gemäß

$$\partial_l O(l) = [\eta(l), O(l)] \quad \text{mit} \quad O(0) = O \quad (2.1.9)$$

mittransformiert werden. Um die gleiche unitäre Transformation zu erzeugen, mit der auch der Hamiltonoperator H transformiert wurde, muss derselbe Generator $\eta(l)$ gewählt werden.

In den folgenden Abschnitten werden nun drei mögliche Generatoren im Detail vorgestellt, welche alle in der Lage sind, den Hamiltonoperator im Limes $l \rightarrow \infty$ in eine einfachere Gestalt zu überführen.

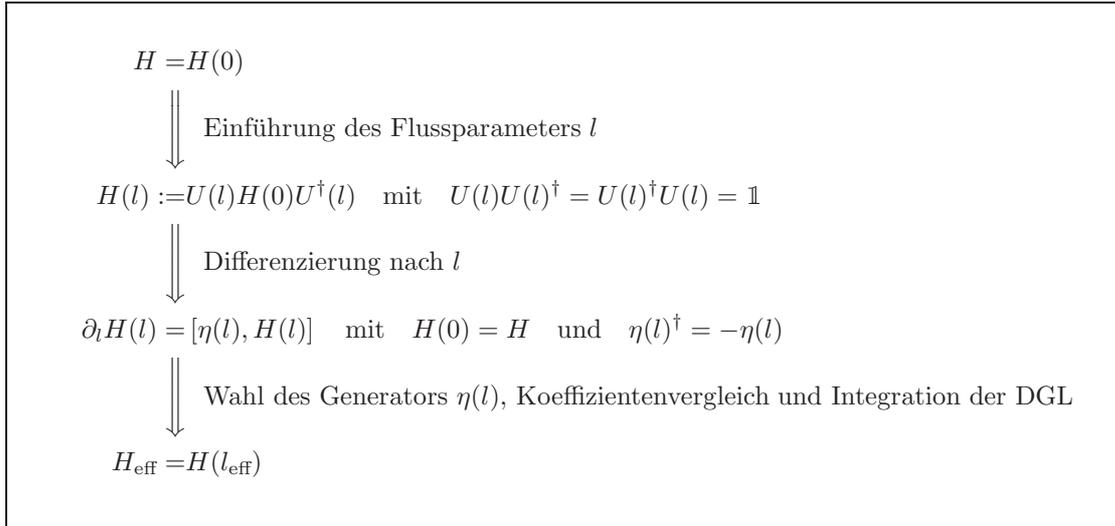


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Flussgleichungsmethode

2.2 Der Generator von Wegner

In einer beliebigen Basis ist der Hamiltonoperator H als Matrix darstellbar, welche im Allgemeinen die Form

$$H(l) = \begin{pmatrix} e_1(l) & h_{12}(l) & h_{13}(l) & \cdots \\ h_{21}(l) & e_2(l) & h_{23}(l) & \cdots \\ h_{31}(l) & h_{32}(l) & e_3(l) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.2.1)$$

besitzt. In der gewählten Basis definiere man nun die Matrix

$$H_d(l) = \begin{pmatrix} e_1(l) & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & e_2(l) & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & e_3(l) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.2.2)$$

welche nur aus den diagonalen Elementen des Hamiltonoperators H besteht. Der von Wegner vorgeschlagene Generator $\eta(l)$ [Weg94] ist gegeben durch

$$\boxed{\eta(l) = [H_d(l), H(l)]} \quad (2.2.3)$$

Der Generator besteht somit aus dem Kommutator des „erwünschten“ und des „unerwünschten“ Anteils des Hamiltonoperators. In den nun folgenden Rechnungen wird zur besseren Lesbarkeit die explizite l -Abhängigkeit der auftretenden Größen unterdrückt. Analog zu (2.2.1) werden die Komponenten des Generators η mit η_{ij} bezeichnet. Die Gleichung (2.2.3) nimmt dadurch in einer kompo-

2 Flussgleichungsmethode

nenntenweisen Darstellung die folgende Gestalt an

$$\begin{aligned}\eta_{ij} &= \sum_k e_i \delta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} e_k \delta_{kj} \\ &= (e_i - e_j) h_{ij} \quad .\end{aligned}\tag{2.2.4}$$

Durch Einsetzen des Generators (2.2.4) in die Flussgleichung (2.1.5) erhält man in der gegebenen Basis

$$\begin{aligned}\partial_l h_{ij} &= \sum_k \eta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \eta_{kj} \\ &= \sum_k (e_i + e_j - 2e_k) h_{ik} h_{kj} \quad .\end{aligned}\tag{2.2.5}$$

Im Folgenden wird nun gezeigt, dass die von Wegner vorgeschlagene Wahl des Generators wirklich zu einer „diagonalen“ Form des Hamiltonoperators führt. Als Ausgangspunkt wird die Spur des Quadrates des Hamiltonoperators betrachtet. Da unter der Spur zyklisch vertauscht werden darf, ist die Spur von H^2 für endliche Systeme invariant unter unitären Transformationen, also insbesondere unabhängig von dem Parameter l . Somit gilt

$$\partial_l \text{Sp} H^2 = 0 \quad .\tag{2.2.6}$$

Aufteilen der Spur in einen diagonalen und nicht-diagonalen Anteil liefert

$$\text{Sp} H^2 = \sum_{i,j} h_{ij} h_{ji} = \sum_i e_i^2 + \sum_{i,j \neq i} h_{ij} h_{ji} \quad ,\tag{2.2.7}$$

woraus mit Hilfe der Gleichung (2.2.6) die Beziehung

$$\sum_i \partial_l e_i^2 = - \sum_{i,j \neq i} \partial_l (h_{ij} h_{ji})\tag{2.2.8}$$

folgt. Die linke Seite der Gleichung (2.2.8) kann nun durch Anwendung der Flussgleichung für den Fall des Wegnerschen Generators (2.2.5) weiter umgeformt werden zu

$$\begin{aligned}\sum_i \partial_l e_i^2 &= 2 \sum_i e_i \partial_l e_i \\ &= 2 \sum_i \left(e_i \cdot 2 \sum_j (e_i - e_j) h_{ij} h_{ji} \right) \quad .\end{aligned}\tag{2.2.9}$$

Das auftretende Produkt $h_{ij} h_{ji}$ ist aufgrund der Hermitizität des Hamiltonoperators gleich dem Betragsquadrat $|h_{ij}|^2$. Nach Umsortierung der Doppelsumme in Gleichung (2.2.9) erhält man zusammen mit Gleichung (2.2.8) schließlich als Ergebnis

$$\boxed{\partial_l \sum_{i,j \neq i} |h_{ij}|^2 = -2 \sum_{i,j} (e_i - e_j)^2 |h_{ij}|^2} \quad .\tag{2.2.10}$$

Die Gleichung (2.2.10) beschreibt das Verhalten der Summe der Betragsquadrate der Nebendiagonalelemente während der kontinuierlichen unitären Transformation. Da die Summe der Betragsquadrate größer oder gleich null und somit insbesondere nach unten beschränkt ist und ebenfalls nach Gleichung (2.2.10) eine monoton fallende Funktion bezüglich l darstellt, konvergiert die Flussgleichung für $l \rightarrow \infty$. Aus diesen Eigenschaften folgt insbesondere, dass die rechte Seite der Gleichung (2.2.10) im Limes $l \rightarrow \infty$ gleich null ist, woraus wiederum folgt, dass

$$\lim_{l \rightarrow \infty} (e_i - e_j)^2 |h_{ij}|^2 = 0 \quad \forall i, j\tag{2.2.11}$$

gilt. Anhand von Gleichung (2.2.11) sieht man, dass alle Nebendiagonalelemente (h_{ij} mit $i \neq j$), welche nicht entartet sind ($e_i \neq e_j$), verschwinden. Im Falle von Entartung ($e_i = e_j$) kann keine Aussage über das Verschwinden des Nebendiagonalelementes h_{ij} getätigt werden und es wird in der Regel endlich bleiben. Sortiert man die Diagonalelemente der Größe nach, erhält man eine Matrix in Blockdiagonalgestalt. Eine vollständige Diagonalisierung wird jedoch bei dem von Wegner vorgeschlagenen Generator (2.2.3) nicht zwangsläufig erreicht.

Dass der diagonale Anteil des Hamiltonoperators $H_d(l)$ im Limes $l \rightarrow \infty$ eine Erhaltungsgröße des effektiven Hamiltonoperators $H(\infty)$ ist, kann auch mit Hilfe der Komponentendarstellung des Wegner-Generators (2.2.4) gefolgert werden. Da die Komponenten des Generators η_{ij} aus dem Produkt $(e_i - e_j)$ mit h_{ij} bestehen und im Limes $l \rightarrow \infty$ aufgrund der oben genannten Gründe mindestens einer dieser Faktoren null ist, gilt

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \eta(l) = \lim_{l \rightarrow \infty} [H_d(l), H(l)] = 0 \quad . \quad (2.2.12)$$

Der oben dargestellte von Wegner [Weg94] stammende Beweis für die Konvergenz der Flussgleichung sowie das Erreichen einer Blockdiagonalgestalt für den gegebenen Generator benutzt als Ausgangspunkt die Invarianz der Spur von H^2 während der unitären Transformation (2.2.6). Für unendlich dimensionale Systeme ist die Spur im Allgemeinen jedoch gar nicht definiert, man denke hierbei zum Beispiel an den quantenmechanischen harmonischen Oszillator, dessen unendlich viele Eigenwerte ($E_n = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$) proportional zu n ansteigen und somit deren Summe divergiert. Der Beweis kann jedoch leicht verallgemeinert werden, so dass er auch für unendlich dimensionale Matrizen seine Gültigkeit behält [DU04].

2.3 Der Generator von Mielke

Die im letzten Abschnitt dargestellte Wahl des Generators kann sich in manchen Fällen als ungünstig erweisen. Besitzt der Hamiltonoperator in einer gegebenen Basis schon eine diagonalähnliche Gestalt wie zum Beispiel eine Bandstruktur, d.h.

$$h_{ij}(0) = 0 \quad \text{für} \quad |i - j| > M \quad , \quad (2.3.1)$$

so bleibt diese bei dem von Wegner vorgeschlagenen Generator im Allgemeinen nicht erhalten. Es wird also während der Rechnung die Komplexität des Problems erhöht. Um dies zu verhindern und die am Anfang gegebene Bandstruktur auch während der kontinuierlichen unitären Transformation beizubehalten, schlug Mielke [Mie98] den antihermiteschen Generator

$$\boxed{\eta_{ij} = \text{sgn}(i - j)h_{ij}} \quad (2.3.2)$$

vor, wobei die Signum-Funktion $\text{sgn}(x)$ wie üblich durch

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x = 0 \\ -1 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (2.3.3)$$

definiert ist.

Durch einsetzen des Mielke-Generators (2.3.2) in die Flussgleichung (2.1.5) erhält man in der gegebenen Basis

$$\begin{aligned} \partial_l h_{ij} &= \sum_k \eta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \eta_{kj} \\ &= -\text{sgn}(i - j) (h_{ii} - h_{jj}) h_{ij} + \sum_{k \neq i, j} \left(\text{sgn}(i - k) + \text{sgn}(j - k) \right) h_{ik} h_{kj} \quad . \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Der erste Term von Gleichung (2.3.4) verschwindet, sobald $|i - j| > M$ gilt, da der Faktor h_{ij} aufgrund der Bandstruktur in diesem Fall gleich null ist. Betrachtet man den zweiten Term von Gleichung (2.3.4), so sieht man, dass gerade das Einführen der Signum-Funktion in die Definition des Generators dafür sorgt, dass auch dieser Term im Fall $|i - j| > M$ verschwindet. Zwar kann der Faktor $h_{ik}h_{kj}$ durchaus ungleich null sein, wenn $|i - j| > M$ gilt, jedoch heben sich dann gerade die beiden Signum-Funktionen gegenseitig auf. Besitzt $H(l = 0)$ also eine Bandstruktur, so bleibt diese während der gesamten kontinuierlichen unitären Transformation bestehen.

Nachdem gezeigt wurde, dass die Bandstruktur erhalten bleibt, stellt sich die Frage nach der Konvergenz der Flussgleichung sowie der Diagonalität des Hamiltonoperators nach der Transformation. Um dies zu klären, betrachtet man die Flussgleichung für die diagonalen Elemente der Matrix

$$\partial_l h_{ii} = 2 \sum_{k \neq i} \operatorname{sgn}(i - k) |h_{ik}|^2 \quad (2.3.5)$$

und bildet die Summe über die ersten r Elemente. Dadurch erhält man folgende Differentialgleichung

$$\partial_l \sum_{i=1}^r h_{ii} = -2 \sum_{i=1}^r \sum_{k>r} |h_{ik}|^2 \leq 0 \quad . \quad (2.3.6)$$

Aus Gleichung (2.3.6) wird ersichtlich, dass die Summe der ersten r Diagonalelemente $\sum_{i=1}^r h_{ii}$ eine monoton fallende Funktion bezüglich l darstellt. Nimmt man zusätzlich an, dass das Eigenwertspektrum des Hamiltonoperators eine untere Schranke besitzt, so ist ebenfalls die Summe der ersten r Diagonalelemente durch die Summe der r kleinsten Eigenwerte nach unten beschränkt. Aus diesen beiden Eigenschaften folgt, dass im Limes $l \rightarrow \infty$ die Ableitung in Gleichung (2.3.6) verschwindet. Da der Wert r beliebig gewählt werden kann, gilt somit

$$\lim_{l \rightarrow \infty} |h_{ik}|^2 = 0 \quad \forall i, k \quad \text{mit} \quad i \neq k \quad . \quad (2.3.7)$$

Man erhält also selbst im Falle von Entartung eine diagonale Gestalt für den Hamiltonoperator $H(\infty)$. Zusätzlich lässt sich anhand der Gleichung (2.3.4) das asymptotische Verhalten der Nebendiagonalelemente ablesen. Da diese gegen null streben (2.3.7) und im zweiten Term von Gleichung (2.3.4) quadratisch auftauchen, kann dieser für hinreichend große l -Werte vernachlässigt werden. Relevant für das asymptotische Verhalten (im Falle $h_{ii} \neq h_{jj}$) ist somit nur der erste Term, wodurch direkt ein exponentielles Verhalten der Nebendiagonalelemente gefolgert werden kann. Desweiteren folgt aus Gleichung (2.3.4), dass, wenn h_{ij} gegen null strebt und l hinreichend groß ist,

$$\operatorname{sgn}(i - j) (h_{ii} - h_{jj}) > 0 \quad (2.3.8)$$

gelten muss. Der Generator ordnet somit im Limes $l \rightarrow \infty$ die Eigenwerte der Größe nach. Dabei ist jedoch zu beachten, dass es eine Verbindung zwischen den zu ordnenden Eigenwerten geben muss. Besitzt die Matrix zum Beispiel schon bei $l = 0$ ein Matrixelement $h_{i_0 i_0}$, welches zu keinem anderen Matrixelement koppelt ($h_{i_0 j} = 0 \quad \forall j$), so wird dieses aufgrund der Struktur der Flussgleichung (2.3.4) nicht umgeordnet. Zusammenfassend besitzt die Flussgleichung für den von Mielke formulierten Generator die folgenden wichtigen Eigenschaften:

- a) Der resultierende Hamiltonoperator $H(\infty)$ besitzt eine diagonale Gestalt, selbst wenn dieser ein entartetes Eigenwertspektrum besitzt.
- b) Eine bereits vorhandene Bandstruktur bleibt auch während der kontinuierlichen unitären Transformation erhalten, $h_{ij} = 0$ für $|i - j| > M$.
- c) Im Falle einer irreduziblen Matrix werden die Eigenwerte der Größe nach geordnet $h_{ii}(\infty) \geq h_{jj}(\infty)$ für $i \geq j$. Für reduzible Matrizen muss jeder irreduzible Block separat betrachtet werden.
- d) Die Nebendiagonalelemente h_{ij} fallen für einen hinreichend großen l -Wert exponentiell ab, $h_{ij} \propto \exp(-|h_{ii}(\infty) - h_{jj}(\infty)|l)$.

Obwohl der von Mielke entwickelte Generator viele Vorteile besitzt, ist die Ausgangssituation der bereits vorhandenen Bandstruktur in der Vielteilchenphysik eher selten gegeben. Üblicher ist hingegen die Situation, dass der Hamiltonoperator den Wert einer Quantenzahl nur um einen endlichen Wert ändern kann. Ein Generator, der diese Struktur während der kontinuierlichen unitären Transformation nicht aufbricht und zusätzlich dafür sorgt, dass im Grenzfall $l \rightarrow \infty$ der zur Quantenzahl gehörige Operator mit dem Hamiltonoperator kommutiert, wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

2.4 Der Generator von Knetter und Uhrig

Die Idee eine Signum-Funktion bei der Definition des Generators zu verwenden wurde unabhängig von Mielke in einer etwas allgemeineren Form auch von Knetter und Uhrig entwickelt. In ihrer ursprünglichen Arbeit [KU00] zur dimerisierten und frustrierten Spin $S = 1/2$ Kette leiten Knetter und Uhrig mit Hilfe der kontinuierlichen unitären Transformation ein allgemeines störungstheoretisches Verfahren her, wodurch ein effektiver Hamiltonoperator in beliebiger Ordnung eines Störungsparameters λ bestimmt werden kann, so dass der ungestörte Hamiltonoperator H_0 eine Erhaltungsgröße darstellt. Für die Entwicklung dieser Störungstheorie, bei der eine explizite Integration der Flussgleichung nicht notwendig ist, müssen lediglich die folgenden zwei Voraussetzungen erfüllt sein.

- a) Der ungestörte Hamiltonoperator H_0 muss ein äquidistantes nach unten beschränktes Spektrum besitzen. Somit können die Energieeigenwerte von H_0 ohne Einschränkung durch $E_i = i$ mit $i \in \mathbb{N}_0$ beschrieben werden. Der zum Energiewert i gehörende Unterraum wird im Folgenden als U_i bezeichnet.
- b) Es existiert eine obere Schranke M , so dass der Störterm des Hamiltonoperators H_S nur Unterräume U_i mit U_j verbindet, für die $|i - j| < M$ gilt.

Das gesamte Problem kann daher durch einen Hamiltonoperator der Form

$$H = H_0 + \lambda \sum_{m=-M}^M T_m \quad \text{mit} \quad (\lambda < 1) \quad (2.4.1)$$

beschrieben werden, wobei T_m den Energieeigenwert um den Wert m erhöht ($m > 0$) oder verringert ($m < 0$)

$$[H_0, T_m] = mT_m \quad . \quad (2.4.2)$$

Sei nun $\{|\nu_i\rangle\}$ die Menge der Eigenvektoren des Hamiltonoperators H_0 . In dieser Basis sind die Koeffizienten der Matrizen H , H_0 und η gegeben durch

$$h_{ij}(l) = \langle \nu_i | H(l) | \nu_j \rangle \quad (2.4.3a)$$

$$h_{ij}^0 = \langle \nu_i | H_0 | \nu_j \rangle \quad (2.4.3b)$$

$$\eta_{ij}(l) = \langle \nu_i | \eta(l) | \nu_j \rangle \quad (2.4.3c)$$

und der von Knetter und Uhrig [KU00] verwendete Generator nimmt die Form

$$\eta_{ij}(l) = \text{sgn}(h_{ii}^0 - h_{jj}^0) h_{ij}(l) \quad (2.4.4)$$

an. Dieser Generator (2.4.4) kann auch unabhängig von einer störungstheoretischen Behandlung betrachtet werden; dazu braucht der Operator H_0 nicht einmal Bestandteil des Hamiltonoperators H zu sein. Möchte man zum Beispiel erreichen, dass der Hamiltonoperator H nach der kontinuierlichen unitären Transformation ($l \rightarrow \infty$) mit einem beliebigen Quantenzahloperator Q kommutiert ($[H, Q] = 0$), so dass Q eine Erhaltungsgröße darstellt, wählt man als Generator

$$\boxed{\eta_{ij}(l) = \text{sgn}(q_{ii} - q_{jj}) h_{ij}(l)} \quad . \quad (2.4.5)$$

2 Flussgleichungsmethode

Die auftretenden Matrixelemente seien dabei analog zu (2.4.3a) bis (2.4.3c) definiert, wobei die Menge $\{|\nu_i\rangle\}$ nun eine Basis von Eigenzuständen zur Quantenzahl Q darstelle

$$h_{ij}(l) = \langle \nu_i | H(l) | \nu_j \rangle \quad (2.4.6a)$$

$$q_{ij} = \langle \nu_i | Q | \nu_j \rangle \quad (2.4.6b)$$

$$\eta_{ij}(l) = \langle \nu_i | \eta(l) | \nu_j \rangle \quad (2.4.6c)$$

Im Vergleich mit dem von Mielke vorgeschlagenen Generator (2.3.2) sieht man, dass lediglich das Argument der Signum-Funktion zu ändern ist. Dort, wo vorher die Indizes der Matrixelemente standen, stehen nun die Diagonalelemente der Erhaltungsgröße.

Der Beweis für die Konvergenz und das Erreichen einer Erhaltungsgröße bei dem von Knetter und Uhrig vorgeschlagenen Generator (2.4.5) verläuft ähnlich zu dem Beweis von Mielke (siehe oben, [Mie98]). Wie schon in den vorherigen Abschnitten wird im Folgenden der Flussparameter l unterdrückt. Setzt man den Generator (2.4.5) in die Flussgleichung (2.1.5) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \partial_l h_{ij} &= \sum_k \eta_{ik} h_{kj} - \sum_k h_{ik} \eta_{kj} \\ &= -\operatorname{sgn}(q_{ii} - q_{jj}) (h_{ii} - h_{jj}) h_{ij} + \sum_{k \neq i, j} \left(\operatorname{sgn}(q_{ii} - q_{kk}) + \operatorname{sgn}(q_{jj} - q_{kk}) \right) h_{ik} h_{kj} \quad . \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien die Eigenzustände $\{|\nu_i\rangle\}$ so angeordnet, dass $q_{kk} \geq q_{ii}$ ist, falls $k > i$ gilt. Betrachtet man nun die Summe der ersten r Diagonalelemente des Hamiltonoperators $H(l)$, so erhält man die Differentialgleichung

$$\boxed{\partial_l \sum_{i=1}^r h_{ii} = 2 \sum_{i=1}^r \sum_{k>r} \operatorname{sgn}(q_{ii} - q_{kk}) |h_{ik}|^2 \leq 0} \quad . \quad (2.4.8)$$

Die rechte Seite der Gleichung (2.4.8) ist aufgrund der Anordnung der Eigenzustände immer kleiner gleich null. Somit verläuft die Argumentation, dass die Flussgleichung für den Fall $l \rightarrow \infty$ konvergiert, ab hier vollkommen analog zu der Argumentation im vorigen Abschnitt, wo die Konvergenz der Flussgleichung im Falle der Mielkeschen Generatorwahl gezeigt wurde. Da die rechte Seite der Gleichung (2.4.8) nie positiv wird, ist die Summe der ersten r Diagonalelemente $\sum_{i=1}^r h_{ii}$ eine monoton fallende Funktion bezüglich l . Ist diese zusätzlich *nach unten beschränkt*, so folgt direkt die Konvergenz für $l \rightarrow \infty$. Aus dem Verschwinden der Ableitung von $\sum_{i=1}^r h_{ii}$ für beliebige Werte von r kann nun geschlossen werden, dass

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \operatorname{sgn}(q_{ii} - q_{kk}) |h_{ik}|^2 = 0 \quad \forall i, k \text{ mit } i \neq k \quad (2.4.9)$$

gelten muss. Um diese Gleichung (2.4.9) zu erfüllen, muss entweder $q_{ii} = q_{kk}$ gelten oder das Matrixelement $h_{ik}(\infty)$ verschwinden. Im ersten Fall sind die Eigenzustände $|\nu_i\rangle$ und $|\nu_k\rangle$ entartet bezüglich des Quantenzahloperators Q . Liegt jedoch keine Entartung bezüglich Q vor, so muss das Matrixelement $h_{ik}(\infty)$, welches die beiden Zustände $|\nu_i\rangle$ und $|\nu_k\rangle$ verbindet, gleich null sein. Der Hamiltonoperator $H(\infty)$ besitzt somit eine Blockdiagonalgestalt und die Quantenzahl Q bildet eine Erhaltungsgröße

$$\lim_{l \rightarrow \infty} [Q, H(l)] = 0 \quad . \quad (2.4.10)$$

Aus dem Beweis wird ersichtlich, dass das oben in a) vorausgesetzte äquidistante Spektrum in H_0 bzw. Q nicht unbedingt notwendig ist für die Verwendung des Generators (2.4.4), solange man nicht an einer systematischen Störungsentwicklung bezüglich eines Störparameters λ interessiert ist. Hingegen ist es bei der Wahl des von Knetter und Uhrig vorgeschlagenen Generators für die Konvergenz der Flussgleichung (2.4.7) wichtig, dass der gesamte Hamiltonoperator H ein nach unten beschränktes Spektrum besitzt. Nicht nur der ungestörte Hamiltonoperator H_0 , wie in a) gefordert, soll diese

Eigenschaft besitzen. Da reale Systeme jedoch einen kleinsten Eigenwert besitzen sollten, wodurch der Grundzustand definiert wird, ist diese Eigenschaft fast immer erfüllt.

Eine weitere Analogie des Knetter-Uhrig-Generators zu dem von Mielke verwendeten Generator ist die Erhaltung einer bestehenden Struktur auch während der kontinuierlichen unitären Transformation. Erneut wird dieses durch die Verwendung der Signum-Funktion erreicht. Besitzt der Starthamiltonoperator $H(0)$ eine Blockstruktur gemäß

$$h_{ij}(0) = 0 \quad \text{für} \quad |q_{ii} - q_{jj}| > M \quad , \quad (2.4.11)$$

so sieht man bei genauerer Betrachtung der Flussgleichung (2.4.7), dass diese Blockstruktur für jeden l Wert bestehen bleibt. Der erste Term in Gleichung (2.4.7) ist direkt proportional zu h_{ij} . Ist also $h_{ij}(0) = 0$, so wird der Koeffizient $h_{ij}(l)$ durch den ersten Term der Gleichung während der Transformation nicht verändert. Im zweiten Term der Gleichung (2.4.7) sorgt gerade die Summe der Signum-Funktionen dafür, dass dieser verschwindet, sobald $|q_{ii} - q_{jj}| > M$ gilt. Der Faktor $h_{ik}h_{kj}$ kann im Allgemeinen von null verschieden sein, selbst wenn $|q_{ii} - q_{jj}| > M$ gilt.

Ebenfalls kann man aufgrund der Struktur der Flussgleichung (2.4.7) Aussagen über das asymptotische Verhalten von Matrixelementen, welche unterschiedliche Blöcke ($q_{ii} \neq q_{jj}$) miteinander verbinden, treffen. Da die entsprechenden Matrixelemente h_{ij} asymptotisch gegen null gehen und im zweiten Term der Flussgleichung nur Produkte $h_{ik}h_{kj}$ von zwei solcher Matrixelemente auftreten, ist dieser Term für hinreichend große l -Werte vernachlässigbar. Sind zusätzlich die Diagonalelemente h_{ii} und h_{jj} unterschiedlich, so folgt aufgrund des ersten Terms der Flussgleichung (2.4.7) ein exponentielles Verhalten der jeweiligen Matrixelemente.

Im nächsten Abschnitt soll die übliche Anwendung des Knetter-Uhrig-Generators, bei der der Quantenzahloperator Q durch einen Teilchenzahloperator bzw. Quasiteilchenzahloperator gegeben ist, genauer untersucht werden. Ebenfalls werden in diesem Fall Aussagen über die Anordnung der Matrixelemente des Hamiltonoperators dargestellt.

2.5 Erzeugung quasiteilchenerhaltender Hamiltonoperatoren

Mit dem im vorherigen Abschnitt diskutierten Generator (2.4.5) lassen sich nun teilchenzahlerhaltende bzw. quasiteilchenzahlerhaltende effektive Hamiltonoperatoren erzeugen. Da es für den Formalismus vollkommen unerheblich ist, ob es sich um echte physikalische Teilchen oder um Quasiteilchen handelt, wird im Folgenden nur noch von Teilchen gesprochen. Um einen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator zu erzeugen, verwendet man als Quantenzahloperator Q einen Operator, der die Teilchenzahl zählt. Mit $|n\rangle$ werde ein Eigenzustand zum Teilchenzahloperator Q bezeichnet, der aus n -Teilchen besteht, so dass gilt

$$Q |n\rangle = n |n\rangle \quad . \quad (2.5.1)$$

Betrachtet man ein System mit k unterschiedlichen Teilchen, so kann ein Zustand durch $|n_1, \dots, n_k\rangle$ beschrieben werden, wobei das i -te Teilchen n_i mal im Zustand enthalten ist.

$$Q |n_1, \dots, n_k\rangle = (n_1 + \dots + n_k) |n_1, \dots, n_k\rangle = n |n_1, \dots, n_k\rangle \quad (2.5.2)$$

In der vorliegenden Arbeit wird der Teilchenzahloperator Q immer gegeben sein durch einen Ausdruck der Form

$$Q = \sum_{i=1}^k n_i \quad \text{mit} \quad n_i = a_i^\dagger a_i, \quad (2.5.3)$$

wobei die Operatoren a_i entweder Bosonen oder Fermionen darstellen. Sie genügen demnach also entweder den Kommutatorrelationen

$$[a_i, a_j^\dagger] = [a_i, a_j]_- = a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad (2.5.4a)$$

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (2.5.4b)$$

für bosonische Operatoren oder den Antikommutatorrelationen

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = [a_i, a_j^\dagger]_+ = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad (2.5.5a)$$

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad (2.5.5b)$$

für fermionische Operatoren. Eine ausführliche Beschreibung der mathematischen Struktur von fermionischen und bosonischen Zuständen findet sich zum Beispiel in den Büchern [BR86, Sch05].

2.5.1 Allgemeine Struktur des effektiven Hamiltonoperators H_{eff}

Die allgemeine Struktur des effektiven Hamiltonoperators H_{eff} , welcher durch die Verwendung des Knetter-Uhrig-Generators im Grenzfall $l \rightarrow \infty$ erzeugt wird, ist gegeben durch

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_1 + H_2 + \dots \quad , \quad (2.5.6)$$

wobei die Operatoren H_n gemäß

$$H_0 = h_0 \mathbf{1} \quad (2.5.7a)$$

$$H_1 = \sum_{i;j}^k h_{i;j} a_i^\dagger a_j \quad (2.5.7b)$$

$$H_2 = \sum_{i_1, i_2; j_1, j_2}^k h_{i_1 i_2; j_1 j_2} a_{i_1}^\dagger a_{i_2}^\dagger a_{j_1} a_{j_2} \quad (2.5.7c)$$

⋮

$$H_n = \sum_{i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n}^k h_{i_1 \dots i_n; j_1 \dots j_n} a_{i_1}^\dagger \cdots a_{i_n}^\dagger a_{j_1} \cdots a_{j_n} \quad (2.5.7d)$$

⋮

definiert sind [KSU03b]. Anhand dieser Struktur sieht man, dass der Eigenwert des Vakuums $|0\rangle$ gegeben ist durch h_0 . Für sämtliche Eigenwerte der Einteilchenzustände $|a_i\rangle = a_i^\dagger |0\rangle$ sind nur die Operatoren H_0 und H_1 relevant. Möchte man die Eigenwerte der Zweiteilchenzustände betrachten, so sind die Operatoren H_0 , H_1 und H_2 zu berücksichtigen, usw. . Der Aufwand der Diagonalisierung steigt somit mit der Teilchenzahl. Eine wichtige Eigenschaft des Knetter-Uhrig-Generators ist jedoch, dass er unter bestimmten Voraussetzungen die Energieeigenwerte so ordnet, dass ein größerer Eigenwert einer gleichen oder größeren Teilchenzahl entspricht. Dies bedeutet insbesondere, dass der Grundzustand des Systems, also der Zustand mit dem kleinsten Eigenwert, nach der kontinuierlichen unitären Transformation dem Vakuumzustand $|0\rangle$ entspricht. Ist man also am Grundzustandserwartungswert und an den niederenergetischen Anregungen interessiert, so müssen Unterräume mit größerer Teilchenzahl nicht betrachtet werden. Diese Eigenschaft soll nun im nächsten Abschnitt 2.5.2 genauer dargestellt werden.

2.5.2 Anordnung der Energieeigenwerte

Um Aussagen über die Anordnung der Eigenzustände des Quantenzahloperators Q in Abhängigkeit derer Energieeigenwerte und Teilchenzahlen zu treffen, betrachtet man die Gleichung (2.4.7). Da die nichtdiagonalen Matrixelemente h_{ij} mit $i \neq j$ im Falle der Konvergenz für große Werte l sich asymptotisch der Null nähern, kann der zweite Term, der Produkte aus jeweils zwei nichtdiagonalen Matrixelementen enthält, für einen hinreichend großen Wert von l gegenüber dem ersten Term vernachlässigt werden. Ist der Parameter l hinreichend groß, so vereinfacht sich demnach Gleichung (2.4.7) zu

$$\partial_l h_{ij} \approx -\text{sgn}(q_{ii} - q_{jj}) (h_{ii} - h_{jj}) h_{ij} \quad . \quad (2.5.8)$$

Konvergiert die kontinuierliche unitäre Transformation, so muss das Matrixelement h_{ij} gegen null streben. Dies ist jedoch für die obige Gleichung (2.5.8) nur dann der Fall, wenn

$$\text{sgn}(q_{ii} - q_{jj}) (h_{ii} - h_{jj}) > 0 \quad (2.5.9)$$

gilt. Demnach ordnet der Knetter-Uhrig-Generator asymptotisch die Zustände so an, dass, wenn $h_{ii} \leq h_{jj}$ gilt, ebenfalls $q_{ii} \leq q_{jj}$ gilt. Insbesondere ordnet er also dem Vakuumzustand $|0\rangle$ den Zustand mit dem kleinsten Energiewert zu und sorgt somit dafür, dass der Grundzustand durch den Vakuumzustand $|0\rangle$ beschrieben wird.

Diese Aussage stimmt jedoch nicht immer. Die durchgeführte Herleitung ist nur dann richtig, wenn das Matrixelement h_{ij} nicht während der gesamten unitären Transformation identisch null ist [HU02]. So kann zum Beispiel ein Zustand i mit dem Eigenwert h_{ii} , der völlig abgekoppelt ist von allen anderen Zuständen ($h_{ij} = 0 \quad \forall j \neq i$) und somit nicht geordnet wird, jeden beliebigen Eigenwert h_{ii} besitzen. Er kann somit auch energetisch tiefer als der Vakuumzustand liegen.

Allgemein sorgen Symmetrien, welche durch den Generator η nicht gebrochen werden, dafür, dass unterschiedliche Matrixelemente nicht miteinander koppeln. In der vorliegenden Arbeit bleibt zum Beispiel bei jeder durchgeführten kontinuierlichen unitären Transformation (vgl. Abschnitt 4.3, 5.3 und 6.3) die z -Komponente des Gesamtspins erhalten, so dass es möglich ist, dass nach der kontinuierlichen unitären Transformation im Zweiteilchen-Unterraum Zustände existieren, welche energetisch tiefer liegen als Zustände im Einteilchen-Unterraum.

2.5.3 Trunkierungsmöglichkeiten

Während das asymptotische Verhalten der kontinuierlichen unitären Transformation üblicherweise anhand der Matrixelemente h_{ij} untersucht wird, geschieht das Aufstellen der Flussgleichung im Falle des Knetter-Uhrig-Generators in konkreten Rechnungen direkt anhand der Flussgleichung (2.1.5). Es muss somit der Kommutator $[\eta, H]$ berechnet werden und anschließend ein Koeffizientenvergleich durchgeführt werden. Eine praktische Eigenschaft des Knetter-Uhrig-Generators ist dabei, dass der Generator η ohne weitere Berechnungen direkt anhand des Hamiltonoperators bestimmt werden kann. Die in der vorliegenden Arbeit betrachteten fermionischen oder bosonischen Hamiltonoperatoren H besitzen alle die Struktur

$$H = H^0 + H^+ + H^- \quad , \quad (2.5.10)$$

wobei der Operator H^0 alle Terme beinhaltet, welche die Teilchenzahl nicht verändern und der Operator H^+ (H^-) nur aus Termen besteht, welche die Teilchenzahl erhöhen (verringern). Damit der Hamiltonoperator hermitesch ist, muss dabei gelten $(H^+)^\dagger = H^-$. Der Knetter-Uhrig-Generator ist dann einfach gegeben durch

$$\eta = H^+ - H^- \quad . \quad (2.5.11)$$

Üblicherweise werden bei der Berechnung des Kommutators $[\eta, H]$ Terme von Operatoren entstehen, welche im Ausgangshamiltonoperator nicht vorhanden waren. Man kann mit diesen neu auftretenden Termen auf unterschiedliche Art und Weise verfahren.

- a) Für eine exakte Rechnung müssten alle neu auftretenden Terme sowohl in dem Ausgangshamiltonoperator als auch, sofern sie die Teilchenzahl verändern, in dem Generator berücksichtigt werden und der Kommutator $[\eta, H]$ erneut unter Berücksichtigung dieser neuen Terme berechnet werden. Natürlich können dabei wieder neue Terme entstehen. Bei unendlich dimensionalen Hilberträumen, so wie es zum Beispiel bei Hamiltonoperatoren, welche Bosonen enthalten, der Fall ist, können so immer mehr neue Terme entstehen, ohne dass das Verfahren abbricht. Alle Koeffizienten, die zu neu entstehenden Termen gehören, besitzen für $l = 0$ den Wert Null.
- b) Eine mögliche Approximation ist es gar keinen oder nur einen Teil der neu entstehenden Terme zu berücksichtigen. Insbesondere bei unendlich dimensionalen Hilberträumen muss eine solche Trunkierung üblicherweise durchgeführt werden. Jedoch selbst bei endlichen hochdimensionalen Problemen ist es in konkreten Rechnungen meist unmöglich, alle neu auftretenden Terme zu berücksichtigen, so dass ebenfalls eine Trunkierung durchgeführt werden muss.

Im Allgemeinen ist es schwierig zu entscheiden, welche Terme wichtig sind und welche vernachlässigt werden können. Neben falschen Ergebnissen kann zum Beispiel die Vernachlässigung mancher Terme dazu führen, dass die kontinuierliche unitäre Transformation nicht einmal mehr konvergiert (vgl. z.B. Abschnitt 5.3). Wichtig zu erwähnen ist auch, dass durch die Trunkierung die Unitarität der kontinuierlichen Transformation verletzt werden kann¹.

Der Knetter-Uhrig-Generator liefert jedoch eine intuitive Möglichkeit der Trunkierung. Dazu ordnet man zunächst die neu entstehenden Terme bezüglich des Vakuumzustands $|0\rangle$ normal. Die Operatoren jedes Terms werden dabei unter Berücksichtigung der Vertauschungsrelationen so geordnet, dass alle teilchenerzeugenden Operatoren a_i^\dagger links von den teilchenvernichtenden Operatoren a_i stehen. Ein Term, der nach der Normalordnung zum Beispiel aus sechs Operatoren besteht, beschreibt eine Wechselwirkung, bei der zumindest ein Zustand beteiligt sein muss, welcher aus mindestens drei Teilchen aufgebaut ist. Für die tiefstliegenden Energieeigenwerte sollten solche Zustände eine geringere Bedeutung haben als Zustände, die zum Beispiel aus nur einem oder zwei Teilchen bestehen.

Es liegt daher nahe nach der Normalordnung nur Terme zu berücksichtigen, die eine gewisse Anzahl an Operatoren nicht überschreiten.

Damit jedoch die zuvor getätigte Annahme gilt, dass die tiefstliegenden Energieeigenwerte durch Zustände mit geringer Teilchenzahl beschrieben werden, muss der Grundzustand hinreichend gut durch den Vakuumzustand $|0\rangle$, bezüglich dessen die Normalordnung durchgeführt wird, beschrieben werden.

2.5.4 Mögliche Variation des Generators

Um die Konvergenz im Falle einer trunkierten Flussgleichung zu verbessern, kann es sinnvoll sein, einen Generator zu verwenden, welcher nicht alle teilchenzahländernden Terme enthält (vgl. dazu Abschnitt 6.3.2 und Abschnitt 6.3.3). Möglich ist zum Beispiel die Verwendung eines Generators, der nur Terme enthält, welche ausschließlich aus Erzeugern oder Vernichtern bestehen. Dadurch werden für $l \rightarrow \infty$ alle Matrixelemente h_{0i} mit $i \neq 0$ gleich null, so dass immer noch der Vakuumwartungswert h_{00} bestimmt werden kann. Eine zuvor vorhandene Blockstruktur (2.4.11) kann in diesem Fall jedoch zerstört werden.

2.6 Anmerkungen zur Implementierung

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Aspekte der Implementierung der Flussgleichungsmethode dargestellt.

Die Bestimmung des Eigenwertspektrums eines Hamiltonoperators H mit Hilfe der Flussgleichungsmethode kann in drei Schritte unterteilt werden:

- i) Aufstellen der Flussgleichung durch Berechnung des Kommutators $[\eta, H]$ und anschließendem Koeffizientenvergleich.
- ii) Integration der Flussgleichung.
- iii) Diagonalisierung des durch die Integration der Flussgleichung erzielten effektiven Hamiltonoperators H_{eff} .

Für die Behandlung des in Kapitel 4 und 5 betrachteten Heisenberg-Dimers ist lediglich ein Programm zur Integration der Flussgleichung notwendig, da das Aufstellen der Flussgleichung und die Bestimmung der relevanten Eigenwerte des effektiven Hamiltonoperators mit vertretbarem Aufwand per Hand durchgeführt werden kann. Dennoch wurde der Kommutator $[\eta, H]$ ebenfalls mit Hilfe des Computeralgebra-Programms MATHEMATICA 4.1 berechnet, um Rechenfehler auszuschließen. Wie man mit Hilfe von MATHEMATICA nicht kommutative Größen behandeln kann, wird in Anhang D beschrieben. MATHEMATICA 4.1 wurde ebenfalls verwendet, um die Flussgleichungen im Fall des Heisenberg-Dimers numerisch zu integrieren.

¹Es wird dennoch im Folgenden auch bei trunkierten Rechnungen immer von unitären Transformationen gesprochen werden.

Bei dem in Kapitel 6 behandelten Heisenberg-Quadrat wurde zum Aufstellen der Flussgleichung ein C++ Programm verwendet, welches im folgenden Abschnitt genauer beschrieben wird. Zum Integrieren der Flussgleichung wurden Runge-Kutta-Methoden verwendet [PTVF02]. Im letzten Abschnitt 2.6.2 dieses Kapitels wird beschrieben, wie letztendlich die effektiven Hamiltonoperatoren diagonalisiert wurden.

Bei einer numerischen Behandlung kann eine gegebene Flussgleichung natürlich nur bis zu einem bestimmten endlichen Wert von l integriert werden. Um ein Maß für die Abweichung zum vollständigen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator zu haben, wird die Größe **srod** (square root of the residual **off-diagonality**) eingeführt. Sie ist definiert als die Wurzel der Summe der Quadrate von derjenigen Koeffizienten, welche zum Generator beitragen.

2.6.1 Beschreibung des Programms zur Bestimmung der Flussgleichung

Die Struktur des Programms, welches zum Aufstellen der Flussgleichung verwendet wurde, entspricht der des Programms von Alexander Reischl, mit dessen Hilfe verschiedene Modelle aus dem Gebiet der stark korrelierten Festkörpersysteme und der optischen Gitter behandelt wurden [Rei06].

In der vorliegenden Arbeit werden Hamiltonoperatoren betrachtet, welche entweder aus fermionischen oder bosonischen Operatoren aufgebaut sind. Diese Operatoren werden als Objekte einer Klasse `op` implementiert und beschrieben durch drei Elemente `i`, `op_state` und `op_ann` (vgl. Abbildung 2.2).

```
class op
{
    private:
        short i;
        short op_state;
        bool op_ann;
        ...
}
```

Abbildung 2.2: Darstellung von Operatoren in der Programmiersprache C++.

Das Element `i` repräsentiert den Gitterplatz, auf dem der entsprechende Operator wirkt. Durch `op_ann` wird angegeben, ob der jeweilige Operator ein Vernichter ist oder nicht, und zuletzt werden durch `op_state` unterschiedliche Operatoren unterschieden, welche auf demselben Gitterplatz wirken. Ein Term des betrachteten Hamiltonoperators besteht aus mehreren solcher Operatoren und einem Vorfaktor (`prefactor`). Diese Terme werden durch eine Klasse `term` dargestellt (vgl. Abbildung 2.3). Wichtig ist dabei den Vorfaktor jedes Terms als exakten Bruch zu behandeln und durch zwei

```
class term
{
    private:
        fraction prefactor;
        vector<op> ops;
        ...
}
```

Abbildung 2.3: Darstellung eines Terms des Hamiltonoperators in der Programmiersprache C++. *Jeder Term des Hamiltonoperators besteht aus einem exakten Bruch als Vorfaktor und einem Vektor von Operatoren.*

ganzzahlige Größen darzustellen, so dass keine Rundungsfehler auftreten und die Flussgleichung somit exakt aufgestellt werden kann.

Der Hamiltonoperator selber wird als Vektor von Termen betrachtet. Das Programm verwendet zunächst keine Symmetrien, so dass wirklich jeder Term des Hamiltonoperators bei dem Aufstellen

der Flussgleichung berücksichtigt wird.

Die zentrale Aufgabe beim Aufstellen der Flussgleichung ist die Berechnung des Kommutators $[\eta, H]$. Im Falle des Knetter-Uhrig-Generators muss der Generator nicht separat abgespeichert werden, da er nur aus Termen besteht, welche schon im Hamiltonoperator selbst vorkommen. Es muss lediglich gemäß (2.5.11) der richtige Vorfaktor bestimmt werden.

Um den Kommutator $[\eta, H]$ vollständig zu berechnen, werden zunächst in einer äußeren Schleife alle Terme des Hamiltonoperators H durchlaufen und in einer inneren Schleife alle Terme des Generators η . Der Kommutator von zwei Termen A und B wird im bosonischen Fall mit Hilfe der Gleichung¹

$$\begin{aligned}
 [A, B] &= \left[\prod_{i=1}^n a_i, \prod_{i'=1}^{n'} b_{i'} \right] \\
 &= \sum_{k=1}^n \sum_{k'=1}^{n'} \left(\left(\prod_{i=1}^{k-1} a_i \right) \left(\prod_{i'=1}^{k'-1} b_{i'} \right) [a_k, b_{k'}] \left(\prod_{j'=k'+1}^{n'} b_{j'} \right) \left(\prod_{j=k+1}^n a_j \right) \right)
 \end{aligned} \tag{2.6.1}$$

berechnet. Im Fall von Fermionen kann der Kommutator $[A, B]$ auch durch Antikommutatoren dargestellt werden, da für gerade n' gilt

$$\begin{aligned}
 [A, B] &= \left[\prod_{i=1}^n a_i, \prod_{i'=1}^{n'} b_{i'} \right] \\
 &= \sum_{k=1}^n \sum_{k'=1}^{n'} (-1)^{(k'-1)} \left(\left(\prod_{i=1}^{k-1} a_i \right) \left(\prod_{i'=1}^{k'-1} b_{i'} \right) \{a_k, b_{k'}\} \left(\prod_{j'=k'+1}^{n'} b_{j'} \right) \left(\prod_{j=k+1}^n a_j \right) \right) .
 \end{aligned} \tag{2.6.2}$$

Alle Terme, die durch den Kommutator entstehen, werden anschließend normalgeordnet, so dass alle Erzeuger links stehen und alle Vernichter rechts. Nach diesem Schritt wird eine eventuelle Trunkierung durchgeführt. Sollten danach Terme existieren, welche noch nicht im Hamiltonoperator vorhanden sind, so wird dementsprechend der Hamiltonoperator erweitert. Die Beiträge zur Flussgleichung durch die neuen Terme werden in einem späteren zweiten Aufruf der beiden Schleifen berücksichtigt. Sollten erneut neue Terme entstehen, so ist noch ein dritter Durchlauf nötig, usw. .

Verwendung der Hermitezität des Hamiltonoperators

Um die Symmetrie der Koeffizienten der Flussgleichung, welche aufgrund der Hermitezität des Hamiltonoperators gegeben ist, zu verwenden, werden Koeffizienten, die zu zueinander adjungierten Termen gehören, zusammengefasst. Dieser Schritt wird erst durchgeführt, nachdem die vollständige Flussgleichung aufgestellt wurde. Um die Rechenzeit des Programms zu verkürzen wäre es sinnvoller gewesen diese Symmetrie schon direkt bei dem Aufstellen der Flussgleichung zu verwenden [Rei06]. Da allerdings im Verlauf dieser Arbeit nicht allzu große Systeme betrachtet wurden und somit die Rechenzeiten zum Aufstellen der Flussgleichung nicht allzu lang waren, wurde aufgrund der aufwendigeren Implementierung darauf verzichtet.

Durch das Reduzieren der Anzahl an Koeffizienten wird der nötige Zeitaufwand zum Integrieren der Flussgleichung verkürzt.

2.6.2 Diagonalisierung der effektiven Hamiltonoperatoren

Bei der Verwendung des Knetter-Uhrig-Generators entsteht ein blockdiagonaler effektiver Hamiltonoperator H_{eff} , welcher nur noch Zustände mit gleicher Teilchenzahl verbindet. Jeder teilchenzahlerhaltende Block kann daher nach der kontinuierlichen unitären Transformation separat behandelt werden.

¹Die Gleichungen 2.6.1 und 2.6.2 gelten für beliebige Operatoren a_i und b_i und nicht nur für Bosonen bzw. Fermionen.

Um diese Blöcke zu diagonalisieren, wurde zunächst eine Matrixdarstellung des effektiven Hamiltonoperators H_{eff} im jeweiligen Unterraum fester Teilchenzahl berechnet und diese anschließend mit MATHEMATICA 4.1 diagonalisiert.

Jeder fermionische oder bosonische Zustand aus n -Teilchen kann durch einen Term von n Operatoren und dem Vakuumzustand $|0\rangle$ dargestellt werden

$$|a_1 \cdots a_n\rangle = a_1^\dagger \cdots a_n^\dagger |0\rangle \quad . \quad (2.6.3)$$

Ein Matrixelement ist dann gegeben durch

$$\langle a'_1 \cdots a'_n | H_{\text{eff}} | a_1 \cdots a_n \rangle = \langle 0 | a'_n \cdots a'_1 H_{\text{eff}} a_1^\dagger \cdots a_n^\dagger | 0 \rangle \quad . \quad (2.6.4)$$

Ordnet man den Ausdruck $a'_n \cdots a'_1 H_{\text{eff}} a_1^\dagger \cdots a_n^\dagger$ normal, so sind für das Matrixelement nur noch die konstanten Beiträge relevant. Auf diese Art und Weise werden die jeweiligen Matrixelemente numerisch berechnet. Dabei wurde die Datenstruktur des Programms, welches zum Aufstellen der Flussgleichung verwendet wurde, übernommen (vgl. Abschnitt 2.6.1).

Die Einschränkung auf teilchenzahlerhaltende Hamiltonoperatoren ist dabei nicht notwendig, so dass es mit dem Programm ebenfalls möglich ist, zu jedem Zeitpunkt l der kontinuierlichen Transformation eine Matrixdarstellung des Hamiltonoperators $H(l)$ zu bestimmen. Lediglich die Beschränkung auf einen Unterraum mit fester Teilchenzahl ist nicht mehr möglich ohne die Ergebnisse zu verfälschen.

3 Vorstellung der betrachteten Modelle

Das in Kapitel 4 und 5 untersuchte Heisenberg-Dimer sowie das in Kapitel 6 betrachtete Heisenberg-Quadrat werden in diesem Kapitel vorgestellt. Beide Modelle sind einfache Spezialfälle des antiferromagnetischen Heisenberg-Modells, welches als Erstes kurz vorgestellt wird. Sowohl für das Heisenberg-Dimer als auch für das Heisenberg-Quadrat ist es möglich, das Eigenwertspektrum komplett anzugeben. Somit können die genäherten Ergebnisse der späteren alternative Behandlung dieser Modelle mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen mit den exakten Ergebnissen verglichen werden.

3.1 Das antiferromagnetische Heisenberg-Modell

Ein häufig untersuchtes effektives Modell ist das isotrope antiferromagnetische Heisenberg-Modell

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad \text{mit} \quad J > 0 \quad . \quad (3.1.1)$$

Dabei wird mit $\langle ij \rangle$ die Summierung über nächste Nachbarn bezeichnet. Die Komponenten S_i^x , S_i^y und S_i^z des Vektoroperators \mathbf{S}_i für den i -ten Spin erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[S_i^\alpha, S_i^\beta] = i \sum_{\gamma} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_i^\gamma \quad , \quad (3.1.2)$$

wobei die griechischen Buchstaben die Werte x, y, z annehmen können und $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ der total antisymmetrische Tensor dritter Stufe ist. Das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum wurde gleich eins gesetzt ($\hbar = 1$). Spinoperatoren auf unterschiedlichen Gitterplätzen i, j mit $i \neq j$ kommutieren. Für den Fall Spin $\frac{1}{2}$ kann jeder Spinoperator \mathbf{S} durch

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (3.1.3)$$

dargestellt werden, wobei der Vektor der Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}$ gegeben ist durch

$$\boldsymbol{\sigma}^T = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z) = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad . \quad (3.1.4)$$

Das antiferromagnetische Heisenberg-Modell (3.1.1) kann in diesem Fall als Grenzfall des Hubbard-Modells [HL67, And59] für große Wechselwirkungen U im Vergleich zur Hüpfamplitude t bei halber Bandfüllung betrachtet werden. Der Hamiltonoperator des Hubbard-Modells ist gegeben durch

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (3.1.5)$$

mit den fermionischen Operatoren $c_{i\sigma}$. Für den Parameter J des Heisenberg-Modells und die im Hubbard-Modell vorkommenden Parameter t und U gilt dann der Zusammenhang $J = \frac{4t^2}{U} \ll 1$.

3.2 Das Heisenberg-Dimer

Das einfachste antiferromagnetische Heisenberg-Modell, welches betrachtet werden kann, ist das antiferromagnetische Heisenberg-Dimer (vgl. Abbildung 3.1). In diesem Falle werden einfach nur zwei



Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Heisenberg-Dimers

wechselwirkende Spins ($S = \frac{1}{2}$) betrachtet, so dass der Hamiltonoperator des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers durch

$$H = JS_1S_2 \quad \text{mit} \quad J > 0 \quad (3.2.1)$$

gegeben ist. Dieses vierdimensionale Modell wird in fast jedem einführenden Buch über Quantenmechanik behandelt, welches Drehimpulsaddition enthält [Nol06].

Das Heisenberg-Dimer (3.2.1) besitzt die zwei miteinander kommutierenden Erhaltungsgrößen

$$\mathbf{S}_{\text{ges}} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (3.2.2a)$$

und

$$S_{\text{ges}}^z = S_1^z + S_2^z \quad , \quad (3.2.2b)$$

wobei \mathbf{S}_{ges} als Gesamtspin bezeichnet wird und S_{ges}^z demnach als z -Komponente des Gesamtspins. Die vier Eigenzustände $|S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle$ des Heisenberg-Dimers (3.2.1) lassen sich durch die Quantenzahlen S_{ges} und m_{ges} dieser beiden Erhaltungsgrößen (3.2.2) vollständig beschreiben

$$\mathbf{S}_{\text{ges}} |S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle = S_{\text{ges}} (S_{\text{ges}} + 1) |S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle \quad \text{für} \quad S_{\text{ges}} = 0, 1 \quad (3.2.3a)$$

$$S_{\text{ges}}^z |S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle = m_{\text{ges}} |S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle \quad \text{für} \quad -S_{\text{ges}} \leq m_{\text{ges}}, m_{\text{ges}} + 1, \dots \leq S_{\text{ges}} \quad . \quad (3.2.3b)$$

Der Zustand mit $S_{\text{ges}} = 0$ wird als Singulett und die drei Zustände mit $S_{\text{ges}} = 1$ als Triplett bezeichnet.

Eine ebenfalls übliche Darstellung der vier Eigenzustände erhält man, indem man die Eigenzustände $|S_{\text{ges}}, m_{\text{ges}}\rangle$ als Summe von Zuständen $|m_1, m_2\rangle$, welche durch die Quantenzahlen m_1 und m_2 bezüglich der Operatoren S_1^z und S_2^z beschrieben werden, darstellt. Üblicherweise wird dabei für $m_i = \frac{1}{2}$ das Symbol \uparrow (Spin up) verwendet und für $m_i = -\frac{1}{2}$ das Symbol \downarrow (Spin down). Die Entwicklungskoeffizienten dieses Basiswechsels sind durch die sogenannten Clebsch-Gordan-Koeffizienten gegeben. Die unterschiedlichen Darstellungen der vier Eigenzustände des Heisenberg-Dimers (3.1.1) und deren Quantenzahlen sowie der jeweilige Eigenwert E sind in Tabelle 3.1 dargestellt.

Tabelle 3.1: Eigenzustände des Heisenberg-Dimers

| Darstellungen des Zustandes | Energieeigenwert E | S_{ges} | m_{ges} |
|---|----------------------|------------------|------------------|
| Singulett-Zustand | | | |
| $ s\rangle = 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$ | $-\frac{3}{4}J$ | 0 | 0 |
| Triplett-Zustände | | | |
| $ t_1\rangle = 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$ | $\frac{1}{4}J$ | 1 | 0 |
| $ t_2\rangle = 1, 1\rangle = \uparrow\uparrow\rangle$ | $\frac{1}{4}J$ | 1 | 1 |
| $ t_3\rangle = 1, -1\rangle = \downarrow\downarrow\rangle$ | $\frac{1}{4}J$ | 1 | -1 |

3.3 Das Heisenberg-Quadrat

In Abbildung 3.2 ist das Heisenberg-Quadrat schematisch dargestellt. Der Hamiltonoperator des

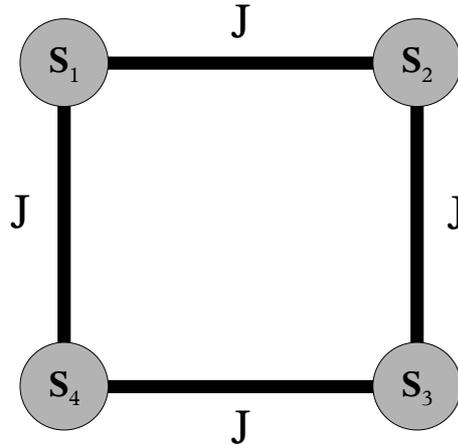


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung eines Heisenberg-Quadrats

Heisenberg-Quadrats ist durch

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = J (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_4 \mathbf{S}_1) \quad \text{mit } J > 0 \quad (3.3.1)$$

gegeben. Dieser Hamiltonoperator (3.3.1) kann auf die Form

$$H = \frac{J}{2} (\mathbf{S}_{\text{ges}}^2 - \mathbf{S}_{13}^2 - \mathbf{S}_{24}^2) \quad (3.3.2)$$

gebracht werden [SL00], wobei der Gesamtspin \mathbf{S}_{ges} und die Größen \mathbf{S}_{13} und \mathbf{S}_{24} gegeben sind durch

$$\mathbf{S}_{\text{ges}} = \mathbf{S}_{13} + \mathbf{S}_{24} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4 \quad (3.3.3a)$$

$$\mathbf{S}_{13} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_3 \quad (3.3.3b)$$

$$\mathbf{S}_{24} = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_4 \quad (3.3.3c)$$

Dabei kommutieren die Operatoren \mathbf{S}_{ges} , \mathbf{S}_{13} und \mathbf{S}_{24} alle untereinander sowie mit dem Hamiltonoperator H des Heisenberg-Quadrats (3.3.1). Die Energieeigenwerte des Heisenberg-Quadrats sind somit gegeben durch

$$E_{S_{\text{ges}}, S_{13}, S_{24}} = \frac{J}{2} \left[S_{\text{ges}}(S_{\text{ges}} + 1) - S_{13}(S_{13} + 1) - S_{24}(S_{24} + 1) \right] \quad (3.3.4)$$

Für den Fall Spin $\frac{1}{2}$ können die Quantenzahlen S_{13} und S_{24} maximal den Wert 1 annehmen und S_{ges} minimal den Wert 0. Der Grundzustandserwartungswert ist demnach $E_0 = -2J$.

Als vierte Erhaltungsgröße, welche mit allen drei Operatoren (3.3.3) kommutiert, kann z.B. noch die z -Komponente des Gesamtspins $S_{\text{ges}}^z = S_1^z + S_2^z + S_3^z + S_4^z$ betrachtet werden. Insgesamt bilden diese vier Erhaltungsgrößen einen vollständigen Satz kommutierender Observablen. In Tabelle 3.2 sind Energieeigenwerte E zu den jeweiligen Quantenzahlen S_{ges} , S_{13} , S_{13} und m_{ges} dargestellt.

Tabelle 3.2: Eigenzustände des Heisenberg-Quadrats

| Energieeigenwert E | S_{ges} | m_{ges} | S_{13} | S_{24} |
|----------------------|------------------|------------------|----------|----------|
| $-2J$ | 0 | 0 | 1 | 1 |
| $-J$ | 1 | -1 | 1 | 1 |
| $-J$ | 1 | 0 | 1 | 1 |
| $-J$ | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0 | 1 | -1 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 1 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | -1 | 1 | 0 |
| 0 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 0 |
| J | 2 | -2 | 1 | 1 |
| J | 2 | -1 | 1 | 1 |
| J | 2 | 0 | 1 | 1 |
| J | 2 | 1 | 1 | 1 |
| J | 2 | 2 | 1 | 1 |

3.4 Spindarstellung mittels Schwinger-Bosonen

Die in den drei vorherigen Abschnitten betrachteten Spinoperatoren \mathbf{S}_i können durch bosonische Operatoren dargestellt werden [Sch65]. Durch das Einführen zweier sogenannter Schwinger Bosonen a_i und b_i pro Gitterplatz i können die Spinoperatoren S_i^+ , S_i^- und S_i^z wie folgt formuliert werden

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = a_i^\dagger b_i \quad (3.4.1a)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y = b_i^\dagger a_i \quad (3.4.1b)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} (a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) \quad . \quad (3.4.1c)$$

Unter Verwendung der Kommutatorrelationen für Bosonen (2.5.4) erfüllen die so definierten Spinoperatoren die Spinalgebra (3.1.2). Allerdings sind bisher die z -Komponenten der Spinoperatoren nicht begrenzt und können noch jeden beliebigen ganzzahligen oder halbzahligen Wert annehmen. Betrachtet man einen Spin S , so erfüllt jeder physikalisch relevante Zustand auf allen Gitterplätzen die lokale Nebenbedingung

$$C_i^b = a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2S = 0 \quad \forall i \quad . \quad (3.4.2)$$

Dadurch wird jede z -Komponente S_i^z auf die relevanten Werte $-S, -S+1, \dots, S$ beschränkt. Bei der Abbildung der Spinoperatoren auf Schwinger-Bosonen wird somit zunächst der für N Gitterplätze S^N -dimensionale Hilbertraum auf abzählbar unendlich viele Dimensionen erweitert. Erst

zusammen mit der Nebenbedingung (3.4.2) kann entschieden werden, welche Zustände physikalisch relevant sind.

3.5 Spindarstellung mittels Fermionen

Für den Fall Spin $\frac{1}{2}$ können die Spinoperatoren \mathbf{S}_i in analoger Weise zu den Schwinger-Bosonen durch fermionische Operatoren dargestellt werden [Abr65]. Auf jeden Gitterplatz i werden dazu zwei fermionische Operatoren $c_{i\uparrow}$ und $c_{i\downarrow}$ definiert und die Spinoperatoren gemäß

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (3.5.1a)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \quad (3.5.1b)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) \quad (3.5.1c)$$

durch diese ersetzt. Die so definierten Spinoperatoren erfüllen aufgrund der Antikommutatorrelationen (2.5.5) für Fermionen die Spinalgebra (3.1.2). Damit die z -Komponenten S_i^z nicht den Wert null annehmen können, muss jedoch jeder Gitterplatz i genau durch ein Fermion besetzt sein. Dies führt zur Nebenbedingung

$$C_i^f = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - 1 = 0 \quad \forall i \quad . \quad (3.5.2)$$

Erneut wird durch eine andere Darstellung der Spinoperatoren der Hilbertraum erweitert und durch eine lokale Nebenbedingung an die Fermionen der physikalisch relevante Unterraum definiert. Allerdings bleibt anders als bei der Darstellung der Spinoperatoren durch Schwinger-Bosonen der Hilbertraum auch ohne die Nebenbedingung (3.5.2) endlich und die Dimension wird lediglich quadriert.

4 Untersuchung der bosonischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers

In diesem Kapitel wird der Hamiltonoperator des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers (3.2.1) zunächst mit Hilfe der in Abschnitt 3.4 definierten Schwinger-Bosonen umformuliert. Die Spinoperatoren, welche die Algebra (3.1.2) erfüllen, werden dabei durch Operatoren ersetzt, welche die bosonischen Vertauschungsrelationen (2.5.4) erfüllen. Dabei ist jedoch zu beachten, dass sich wie in Abschnitt 3.4 beschrieben die Dimension des Hilbertraumes erhöht. Die physikalischen Zustände, welche für die Physik des ursprünglichen Heisenberg-Dimers (3.2.1) relevant sind, erfüllen die Nebenbedingung (3.4.2). Alle restlichen Zustände, die durch den Wechsel der Darstellung von der Spinalgebra zur bosonischen Algebra entstehen und die Nebenbedingung (3.4.2) nicht erfüllen, werden von nun an als unphysikalisch bezeichnet. Aufgrund der Struktur der Nebenbedingung folgt für sämtliche physikalische Zustände, dass diese in einem Unterraum liegen, dessen Zustände aus N mal $2S$ Teilchen bestehen. N ist dabei die Anzahl an Gitterplätzen und S der betrachtete Spin, der in der vorliegenden Arbeit immer durch den Wert $\frac{1}{2}$ gegeben ist.

Arovas und Auerbach [AA88] führten in der Schwingerbosonendarstellung des Heisenberg-Modells für die eindimensionale Kette und das quadratische zweidimensionale Gitter Molekularfeld-Rechnungen für den ferromagnetischen und den antiferromagnetischen Fall durch. Dazu verwendeten sie eine Sattelpunktsnäherung der Funktionalintegraldarstellung der Zustandsfunktion. Sarker et al. [SJKM89] führten für die Schwingerbosonendarstellung des Heisenberg-Modells eine direkte Molekularfeld-Näherung durch (vgl. Ref. [Weg]). Eine wichtige Rolle bei dieser Näherung spielt die Behandlung der Nebenbedingung (3.4.2), welche die physikalisch relevanten Zustände kennzeichnet. Um die Nebenbedingung bei der Molekularfeld-Rechnung zumindest im Mittel zu erfüllen (vgl. (4.2.2)), wird üblicherweise ein Lagrangeparameter λ eingeführt [SJKM89].

Im folgenden Abschnitt 4.2.1 wird in dazu analoger Weise eine Molekularfeld-Rechnung für den Spezialfall des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers bei der Temperatur $T = 0$ durchgeführt. Zusätzlich wird in den Abschnitten 4.2.2 und 4.2.3 für diesen Spezialfall eine andere Möglichkeit zur Behandlung der Nebenbedingung untersucht. Im Gegensatz zur Verwendung des Lagrangeparameters λ , bei der die Nebenbedingung linear zum Hamiltonoperator addiert wird, wird dabei in den Abschnitten 4.2.2 und 4.2.3 die Nebenbedingung (3.4.2) für jeden Gitterplatz quadratisch zum ursprünglichen Hamiltonoperator addiert. Wählt man den dazu gehörigen Variationsparameter U positiv, so werden Zustände, welche die Nebenbedingung nicht erfüllen, durch einen solchen quadratischen Term energetisch erhöht. Da das Heisenberg-Modell im Falle des Dimers sehr einfach exakt gelöst werden kann (vgl. Tabelle (3.1)), können die genäherten Ergebnisse der Molekularfeld-Rechnung leicht mit den exakten Werten verglichen werden.

Bei der Molekularfeld-Rechnung wird ein variationeller Grundzustand $|G\rangle$ bestimmt, der mathematisch durch den Vakuumzustand bezüglich der Quasiteilchenoperatoren beschrieben wird, in denen der Molekularfeld-Hamiltonoperator diagonal ist. Der genäherte Grundzustand liegt somit in der Molekularfeld-Formulierung nicht mehr in einem $2NS$ -Teilchen-Unterraum, so wie es bei der ursprünglichen Schwingerbosonendarstellung der Fall war. Im Rahmen einer Molekularfeld-Rechnung kann ebenfalls der Einteilchen-Unterraum der Quasiteilchen beschrieben werden.

Diese Anregungen aus dem Grundzustand sind jedoch in dem hier behandelten Modell unphysikalisch, was man zum Beispiel anhand der z -Komponente des Gesamtspins (4.1.5) sehen kann. Diese Erhaltungsgröße ist invariant unter den in Abschnitt 4.2 und 4.3 durchgeführten kanonischen Transformationen, und die entsprechende Quantenzahl der physikalischen Zustände ist 0 für das Singulett und -1, 0 und 1 für jeweils einen der Triplettzustände. Ein Zustand mit ungerader Teilchenanzahl besitzt jedoch eine halbzahlige z -Komponente des Gesamtspins und kann daher keinen physikalischen Zustand beschreiben. Um weitere physikalische Zustände außer dem Grundzustand zu beschreiben, muss demnach ein effektiver Hamiltonoperator bestimmt werden, der auch noch den Zweiteilchen-Unterraum näherungsweise abbildet. Eine Methode, die in der Lage ist, effektive Hamiltonoperatoren

auch über den Einteilchen-Sektor hinaus zu bestimmen, ist die in Kapitel 2 dargestellte Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen. Mit deren Hilfe sollen in Abschnitt 4.3 die zuvor durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen verbessert werden, indem die bei der Molekularfeld-Näherung vernachlässigten Operatoren ebenfalls berücksichtigt werden. Da wie in Abschnitt 2.5.3 beschrieben auch bei der kontinuierlichen unitären Transformation Näherungen durchgeführt werden müssen, dienen die Molekularfeld-Rechnungen zur Bestimmung eines möglichst guten Startpunktes (vgl. Abschnitt 2.5.3).

4.1 Formulierung und Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers in bosonischer Darstellung

Auf beiden Gitterplätzen des Dimers werden die Spinoperatoren gemäß (3.4.1) durch Schwinger-Bosonen ersetzt. Somit erhält man für den Hamiltonoperator des antiferromagnetischen ($J > 0$) Heisenberg-Dimers

$$H_0 = \frac{J}{2} \left(a_1^\dagger a_2 b_1 b_2^\dagger + a_1 a_2^\dagger b_1^\dagger b_2 \right) + \frac{J}{4} \left(a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2 - a_1^\dagger a_1 b_2^\dagger b_2 - a_2^\dagger a_2 b_1^\dagger b_1 \right) . \quad (4.1.1)$$

Die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z ist gegeben durch

$$S_{\text{ges}}^z = \frac{1}{2} \left(a_1^\dagger a_1 - b_1^\dagger b_1 \right) + \frac{1}{2} \left(a_2^\dagger a_2 - b_2^\dagger b_2 \right) . \quad (4.1.2)$$

Sie entspricht also der Anzahl der Bosonen vom Typ a minus der Anzahl der Bosonen vom Typ b multipliziert mit $\frac{1}{2}$. Um den Rechnungen von Arovas und Auerbach [AA88] bzw. Sarker et al. [SJKM89] zu entsprechen, werden nun noch zwei weitere Umformungen durchgeführt. Zunächst wird, um eine symmetrischere Darstellung für den antiferromagnetischen Fall zu erhalten, eine Rotation um π auf dem Gitterplatz 2 durchgeführt

$$a_2 \rightarrow -b_2 , \quad b_2 \rightarrow a_2 . \quad (4.1.3)$$

Diese Rotation lässt die Nebenbedingung für die physikalischen Zustände (3.4.2) invariant, und der Hamiltonoperator (4.1.1) nimmt nach der Rotation die Form

$$H_{0,a} = -\frac{J}{2} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger b_1 b_2 + a_1 a_2 b_1^\dagger b_2^\dagger \right) + \frac{J}{4} \left(a_1^\dagger a_1 b_2^\dagger b_2 + a_2^\dagger a_2 b_1^\dagger b_1 - a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 - b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2 \right) \quad (4.1.4)$$

an. Zu beachten ist, dass sich die Darstellung der z -Komponente des Gesamtspins durch diese Rotation ändert und somit nach der Rotation durch

$$S_{\text{ges}}^z = \frac{1}{2} \left(a_1^\dagger a_1 - b_1^\dagger b_1 \right) - \frac{1}{2} \left(a_2^\dagger a_2 - b_2^\dagger b_2 \right) \quad (4.1.5)$$

gegeben ist. Unter Verwendung der Nebenbedingung (3.4.2) kann der Hamiltonoperator (4.1.4) weiter umgeformt werden zu

$$H_{0,b} = -\frac{J}{2} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger b_1 b_2 + a_1 a_2 b_1^\dagger b_2^\dagger + a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2 \right) + JS^2 = -\frac{J}{2} \left(A_{12}^\dagger A_{12} - 2S^2 \right) \quad (4.1.6)$$

mit dem Operator

$$A_{12} = a_1 a_2 + b_1 b_2 . \quad (4.1.7)$$

Die Darstellung (4.1.6) entspricht der des $SU(2)$ Heisenberg-Modells [AA88, Aue94, SJKM89]. Ohne die Rotation (4.1.3) auf dem Gitterplatz 2 wäre der Operator (4.1.7) nicht symmetrisch unter Vertauschung der Indizes 1 und 2. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass der Hamiltonoperator (4.1.6) ein nach unten hin nicht begrenztes Eigenwertspektrum besitzt.

Die vier physikalischen Eigenzustände der Hamiltonoperatoren (4.1.4) und (4.1.6), welche die Nebenbedingung (3.4.2) erfüllen, sind gegeben durch

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger + b_1^\dagger b_2^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.1.8a)$$

$$|t_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger - b_1^\dagger b_2^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.1.8b)$$

$$|t_2\rangle = a_1^\dagger b_2^\dagger |0\rangle \quad (4.1.8c)$$

$$|t_3\rangle = a_2^\dagger b_1^\dagger |0\rangle \quad (4.1.8d)$$

Der Zustand $|0\rangle$ sei dabei das Vakuum bezüglich der Operatoren a_i und b_i . Wie üblich besitzt das Singulett $|s\rangle$ den Energieeigenwert $-\frac{3}{4}J$ und die Triplettzustände $|t_i\rangle$ jeweils den Energieeigenwert $\frac{1}{4}J$.

4.2 Molekularfeld-Rechnungen für das bosonische Heisenberg-Dimer

In den folgenden drei Abschnitten sollen mögliche Varianten von Molekularfeld-Rechnungen für das bosonische Heisenberg-Dimer untersucht werden, um einen möglichst guten Startpunkt für eine spätere kontinuierliche unitäre Transformation zu bestimmen.

4.2.1 Übliche Variante der Molekularfeld-Rechnung

Zunächst soll eine Molekularfeld-Rechnung für den Hamiltonoperator $H_{0,b}$ (4.1.6) des bosonischen Heisenberg-Dimers in analoger Art und Weise zu Arovass und Auerbach [AA88] bzw. Sarker et al. [SJKM89] durchgeführt werden. Um die Nebenbedingung (3.4.2) bei der Molekularfeld-Näherung zumindest im Mittel zu erfüllen, wird zu dem Hamiltonoperator $H_{0,b}$ ein Term der Form

$$H_\lambda = \lambda \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 \right) - \lambda 4S \quad (4.2.1)$$

addiert. Der Lagrangeparameter λ soll später so gewählt werden, dass

$$\langle a_i^\dagger a_i \rangle + \langle b_i^\dagger b_i \rangle = 2S \quad (4.2.2)$$

gilt. Dabei bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ den Erwartungswert bezüglich des noch zu bestimmenden Grundzustandes des Molekularfeld-Hamiltonoperators $H_{b,\lambda}^{\text{MF}}$. Für den Hamiltonoperator

$$H_{b,\lambda} = H_{0,b} + H_\lambda \quad (4.2.3)$$

soll nun eine Molekularfeld-Näherung durchgeführt werden [Weg]. Für die auftretenden Erwartungswerte werde angenommen, dass diese symmetrisch bezüglich der Indizes 1 und 2 sowie unter Vertauschung der Bosonen von Typ a mit Typ b sind. Als Schreibweise für die Erwartungswerte wird im Folgenden

$$\chi_0 = \langle a_i^\dagger a_i \rangle = \langle b_i^\dagger b_i \rangle \quad (4.2.4a)$$

$$\chi_1 = \langle a_1 a_2 \rangle = \langle b_1 b_2 \rangle \Rightarrow \overline{\chi_1} = \langle a_1^\dagger a_2^\dagger \rangle = \langle b_1^\dagger b_2^\dagger \rangle \quad (4.2.4b)$$

verwendet. Alle anderen auftretenden Erwartungswerte werden null gesetzt. Dieses Vorgehen ist analog zu den Rechnungen bei von Arovass und Auerbach [AA88] bzw. Sarker et al. [SJKM89]. Der

Molekularfeld-Hamiltonoperator besitzt dadurch die Form

$$\begin{aligned}
 H_{b,\lambda}^{\text{MF}} = & \Lambda \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 \right) \\
 & + \Gamma \left(a_1^\dagger a_2^\dagger + b_1^\dagger b_2^\dagger \right) + \bar{\Gamma} \left(a_1 a_2 + b_1 b_2 \right) \\
 & + \Omega \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.2.5}$$

wobei die Faktoren Λ , Γ und Ω gegeben sind durch

$$\Lambda = -\frac{J}{2}\chi_0 + \lambda \tag{4.2.6a}$$

$$\Gamma = -J\chi_1 \tag{4.2.6b}$$

$$\Omega = J(\chi_0^2 + 2|\chi_1|^2 + S^2) - 4\lambda S \quad . \tag{4.2.6c}$$

Der Hamiltonoperator (4.2.5) kann durch eine Bogoliubov-Transformation diagonalisiert werden (vgl. Anhang A.2.1).

$$H_{b,\lambda}^{\text{MF}} = \sqrt{\Lambda^2 - (\Gamma e^{-i\varphi})^2} \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 + \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1 + \beta_2^\dagger \beta_2 + 2 \right) - 2\Lambda + \Omega \tag{4.2.7}$$

Die neuen bosonischen Operatoren α_i und β_i sind dabei gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & -e^{i\varphi} \sinh \theta \\ -e^{-i\varphi} \sinh \theta & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix} \tag{4.2.8a}$$

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & -e^{i\varphi} \sinh \theta \\ -e^{-i\varphi} \sinh \theta & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^\dagger \end{pmatrix} \quad . \tag{4.2.8b}$$

Damit der Hamiltonoperator (4.2.7) die dargestellte diagonale Form besitzt, müssen die beiden Winkel θ und φ so gewählt werden, dass die Bedingungen

$$\Gamma e^{-i\varphi} = \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \in \mathbb{R} \tag{4.2.9a}$$

und

$$\Lambda \sinh 2\theta + \Gamma e^{-i\varphi} \cosh 2\theta = 0 \tag{4.2.9b}$$

erfüllt sind. Der Hamiltonoperator (4.2.7) besitzt als Grundzustand $|G\rangle$, der im Weiteren auch als Molekularfeld-Grundzustand bezeichnet werden soll, das Vakuum bezüglich der bosonischen Operatoren α_i und β_i ,

$$\alpha_i |G\rangle = 0, \quad \beta_i |G\rangle = 0 \quad \text{für } i = 1, 2 \quad . \tag{4.2.10}$$

Die Erwartungswerte χ_0 und χ_1 werden nun bezüglich dieses neuen Molekularfeld-Grundzustands $|G\rangle$ berechnet. Dazu werden die Operatoren a_1 , a_2 , b_1 und b_2 durch die neuen Operatoren α_1 , α_2 , β_1 und β_2 dargestellt. Da im Folgenden nur Erwartungswerte bezüglich des neuen Vakuums $|G\rangle$ berechnet werden, wird anstelle von $\langle G| \cdot |G\rangle$ als abkürzende Schreibweise nur $\langle \cdot \rangle$ verwendet. Man erhält für χ_0 und χ_1

$$\chi_0 = \langle a_i^\dagger a_i \rangle = \langle b_i^\dagger b_i \rangle = \sinh^2 \theta \tag{4.2.11a}$$

$$\chi_1 = \langle a_1 a_2 \rangle = \langle b_1 b_2 \rangle = \frac{1}{2} e^{i\varphi} \sinh 2\theta \quad . \tag{4.2.11b}$$

Alle anderen Erwartungswerte bezüglich $|G\rangle$, die bei der Molekularfeld-Näherung vernachlässigt worden sind, ergeben null, wie es für die Selbstkonsistenz notwendig ist. Im Folgenden soll nur noch der Fall $S = \frac{1}{2}$ betrachtet werden. Um die Nebenbedingung (3.4.2) im Mittel zu erfüllen, muss demnach

$$\chi_0 = \sinh^2 \theta = \frac{1}{2} \quad (4.2.12)$$

gelten, wodurch der Betrag des Winkels θ festgelegt wird. Für den Lagrangeparameter λ folgt dadurch zusammen mit der Bedingung (4.2.9b)

$$\boxed{\lambda = \frac{5}{4}J} \quad . \quad (4.2.13)$$

Die Anregungsenergie ω für ein Quasiteilchen beträgt

$$\boxed{\omega = \sqrt{\Lambda^2 - (\Gamma e^{-i\varphi})^2} = \frac{1}{2}J} \quad , \quad (4.2.14)$$

und die Grundzustandsenergie E_0 ist gegeben durch

$$\boxed{E_0 = \langle H_{b,\lambda}^{\text{MF}} \rangle = \langle H_{b,\lambda} \rangle = \langle H_{0,b} \rangle = -\frac{3}{2}J} \quad . \quad (4.2.15)$$

Die Erwartungswerte $\langle H_{b,\lambda} \rangle$ und $\langle H_{0,b} \rangle$ sind identisch, da λ gerade so gewählt wurde, dass die Nebenbedingung (3.4.2) im Mittel erfüllt ist. Dass die Erwartungswerte $\langle H_{b,\lambda}^{\text{MF}} \rangle$ und $\langle H_{b,\lambda} \rangle$ übereinstimmen, wurde als zusätzlicher Test für die Selbstkonsistenz der Rechnung überprüft. Da aber, wie schon oben erwähnt, alle bei der Molekularfeld-Näherung vernachlässigten Erwartungswerte verschwinden, sind die Erwartungswerte $\langle H_{b,\lambda}^{\text{MF}} \rangle$ und $\langle H_{b,\lambda} \rangle$ identisch. Bemerkenswert ist, dass die Grundzustandsenergie $E_0 = -\frac{3}{2}J$ tiefer liegt als der exakte Wert für den Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers von $-\frac{3}{4}J$. Dies bedeutet, dass der variationelle Grundzustand $|G\rangle$, der durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmt wurde, nicht vollständig im physikalischen Unterraum liegt und somit Anteile an unphysikalischen Zuständen besitzt. Berechnet man den Erwartungswert $\langle H_{0,a} \rangle$, so erhält man

$$\langle H_{0,a} \rangle = J \left(-\frac{3}{2} \cosh^2(\theta) \sinh^2(\theta) \right) = J \left(-\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right) = -\frac{9}{8}J \quad . \quad (4.2.16)$$

Die beiden Erwartungswerte $\langle H_{0,a} \rangle$ und $\langle H_{0,b} \rangle$ stimmen somit nicht überein. Dies liegt erneut daran, dass der Grundzustand $|G\rangle$ nicht vollständig im physikalischen Unterraum liegt. Um den Hamiltonoperator $H_{0,a}$ in den Hamiltonoperator $H_{0,b}$ zu überführen, muss die aus der Nebenbedingung (3.4.2) folgende Operator-Gleichung

$$\begin{aligned} 1 &= 4S^2 \\ &= \left(a_1^\dagger a_1 + b_1^\dagger b_1 \right) \left(a_2^\dagger a_2 + b_2^\dagger b_2 \right) \\ &= a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 b_2^\dagger b_2 + a_2^\dagger a_2 b_1^\dagger b_1 + b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2 \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

verwendet werden. Zwar erfüllt der Molekularfeld-Grundzustand $|G\rangle$ im Mittel die Nebenbedingung (3.4.2), die Operatorgleichung (4.2.17) erfüllt er im Mittel jedoch nicht, denn es gilt

$$\begin{aligned} \langle a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2 + a_1^\dagger a_1 b_2^\dagger b_2 + b_1^\dagger b_1 a_2^\dagger a_2 \rangle &= 2 \cosh^2(\theta) \sinh^2(\theta) + 4 \sinh^4(\theta) \\ &= 2 \frac{3}{2} \frac{1}{2} + 4 \frac{1}{4} \\ &= \frac{5}{2} \neq 1 \quad . \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

Dies bedeutet jedoch, dass man durch Verwendung der Operatorgleichung (4.2.17) im Rahmen der Molekularfeld-Rechnung jeden erdenklichen Grundzustandserwartungswert E_0 erzeugen kann. Dazu addiert man lediglich einen Term der Form

$$H_x = x \left((a_1^\dagger a_1 + b_1^\dagger b_1) (a_2^\dagger a_2 + b_2^\dagger b_2) - 1 \right) \quad (4.2.19)$$

zu dem Ausgangshamiltonoperator H_0 . Bei einer exakten Behandlung ist dieser Term gleich null. In Molekularfeld-Näherung liefert er jedoch einen Wert ungleich null, so dass man durch Wahl des Parameters x den genäherten Grundzustandserwartungswert E_0 beliebig einstellen kann. Dies gilt nicht nur für den Grundzustandserwartungswert E_0 , sondern ebenfalls auch für die Anregungsenergie ω sowie für den Lagrange-Parameter λ . So erhält man zum Beispiel für den Hamiltonoperator $H_{a,\lambda}$ einen Wert für die Anregungsenergie ω von $\frac{3}{8}J$ und ein Lagrangeparameter λ von $\frac{3}{4}J$ anstelle von $\omega = \frac{1}{2}J$ und $\lambda = \frac{5}{4}$, wie es für den Hamiltonoperator $H_{b,\lambda}$ der Fall ist. Einzig invariant ist der Winkel θ der *Bogoliubov*-Transformation, da dieser direkt aus der Bedingung (4.2.12) für den Erwartungswert χ_0 bestimmt wird.

4.2.2 Energetische Erhöhung der unphysikalischen Zustände

Im vorherigen Abschnitt wurde zum Hamiltonoperator ein weiterer Term H_λ (4.2.1) addiert, wobei das λ bei der Molekularfeld-Rechnung so bestimmt wurde, dass die Nebenbedingung (3.4.2) im Mittel erfüllt war. Sowohl für den Hamiltonoperator $H_{0,a}$ wie auch für den Hamiltonoperator $H_{0,b}$ lieferte eine so durchgeführte Molekularfeld-Rechnung einen Grundzustandserwartungswert E_0 , der kleiner war als der exakte Werte für den Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers. Dies kann damit erklärt werden, dass die jeweiligen Hamiltonoperatoren unphysikalische Zustände, welche die Nebenbedingung (3.4.2) nicht erfüllen, besitzen, und deren Erwartungswerte unterhalb des physikalischen Grundzustandserwartungswerts liegen. Anstelle der Addition des Terms H_λ kann es daher sinnvoll sein, einen Term der Form

$$H_U = U \left(a_1^\dagger a_1 + b_1^\dagger b_1 - 2S \right)^2 + U \left(a_2^\dagger a_2 + b_2^\dagger b_2 - 2S \right)^2 \quad (4.2.20)$$

zu dem jeweiligen Hamiltonoperator zu addieren, der die Nebenbedingung für jeden Gitterplatz quadratisch enthält, und nicht nur linear wie der Term H_λ . Für positive Werte von U bestraft dieser Term (4.2.20) die unphysikalischen Zustände energetisch. Man schiebt sozusagen die unphysikalischen Zustände mit steigendem U immer weiter nach oben im Energiespektrum, während die Eigenwerte der physikalischen Zustände nicht verändert werden. Im Rahmen der folgenden Molekularfeld-Betrachtungen soll der Parameter U so gewählt werden, dass die Nebenbedingung (3.4.2) erneut im Mittel erfüllt ist.

Analog zum vorherigen Abschnitt wird für den Hamiltonoperator

$$H_{b,U} = H_{0,b} + H_U \quad (4.2.21)$$

eine Molekularfeld-Näherung durchgeführt [Weg]. Ebenfalls werden dieselben Erwartungswerte vernachlässigt und erneut die Schreibweisen (4.2.4) verwendet. Man erhält dadurch den Molekularfeld-Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H_{b,U}^{\text{MF}} = & \Lambda \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 \right) \\ & + \Gamma \left(a_1^\dagger a_2^\dagger + b_1^\dagger b_2^\dagger \right) + \bar{\Gamma} \left(a_1 a_2 + b_1 b_2 \right) \\ & + \Omega \quad , \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

wobei die Faktoren Λ , Γ und Ω in diesem Fall gegeben sind durch

$$\Lambda = -\frac{J}{2}\chi_0 + U(6\chi_0 - 4S + 1) \quad (4.2.23a)$$

$$\Gamma = -J\chi_1 \quad (4.2.23b)$$

$$\Omega = J(\chi_0^2 + 2|\chi_1|^2 + S^2) + U(8S^2 - 12\chi_0^2) \quad . \quad (4.2.23c)$$

Wie zuvor kann der Hamiltonoperator (4.2.22) durch eine Bogoliubov-Transformation diagonalisiert werden. Die neuen bosonischen Operatoren α_i und β_i sind dabei erneut gegeben durch (4.2.8). Ebenfalls müssen für eine diagonale Form des Hamiltonoperators $H_{b,U}^{\text{MF}}$ wieder die Bedingungen (4.2.9) erfüllt sein. Der diagonalisierte Hamiltonoperator ist dann gegeben durch

$$H_{b,U}^{\text{MF}} = \sqrt{\Lambda^2 - (\Gamma e^{-i\varphi})^2} \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 + \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1 + \beta_2^\dagger \beta_2 + 2 \right) - 2\Lambda + \Omega \quad . \quad (4.2.24)$$

Für den Fall $S = \frac{1}{2}$ wird durch die Forderung

$$\chi_0 = \frac{1}{2} \quad (4.2.25)$$

für den Erwartungswert χ_0 wie im vorherigen Abschnitt der Betrag des Winkels θ festgelegt. Somit kann der Wert des Parameters U durch die Bedingung (4.2.9b) bestimmt werden.

$$\boxed{U = \frac{5}{8}J} \quad (4.2.26)$$

Die Anregungsenergie ω für ein Quasiteilchen beträgt

$$\boxed{\omega = \sqrt{\Lambda^2 - (\Gamma e^{-i\varphi})^2} = \frac{1}{2}J} \quad (4.2.27)$$

und die Grundzustandsenergie E_0 ist gegeben durch

$$\boxed{E_0 = \langle H_{b,U}^{\text{MF}} \rangle = \langle H_{b,U} \rangle = \frac{3}{8}J} \quad . \quad (4.2.28)$$

Führt man die analoge Rechnung mit dem Hamiltonoperator $H_{a,U}$ durch, so muss $U = \frac{3}{8}J$ gewählt werden, damit die Nebenbedingung (3.4.2) im Mittel erfüllt ist. Die Grundzustandsenergie E_0 ist in diesem Fall gleich null und die Anregungsenergie $\omega = \frac{3}{8}J$. Dass erneut die Ergebnisse von der Wahl des Hamiltonoperators abhängen, ist nicht weiter verwunderlich, da die gleiche Transformation (4.2.8) zur Diagonalisierung verwendet wurde und somit auch der gleiche variationelle Grundzustand $|G\rangle$ erzielt wurde. In beiden Fällen ist die Erhöhung der Grundzustandsenergie E_0 gegeben durch

$$\langle H_U \rangle = 3U \quad . \quad (4.2.29)$$

4.2.3 Untersuchung einer alternativen Molekularfeld-Näherung

Durch die Addition des Terms H_U liegen nun sowohl für den Hamiltonoperator $H_{a,U}^{\text{MF}}$ als auch für den Hamiltonoperator $H_{b,U}^{\text{MF}}$ die Grundzustandsenergien über dem exakten Wert für den Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers. In diesem Abschnitt soll nun exemplarisch für den Hamiltonoperator $H_{b,U}$ versucht werden, die Molekularfeld-Näherung zu verbessern. Während in den vorherigen Abschnitten 4.2.1 und 4.2.2 ein Großteil der bei der Normalordnung auftretenden Erwartungswerte null gesetzt wurde und man so einen Molekularfeld-Hamiltonoperator analog zu Arovass und Auerbach [AA88] bzw. zu Sarker et al. [SJKM89] erhielt, sollen nun nur noch die Erwartungswerte als Null angenommen werden, deren Operatoren die z -Komponente des Gesamt-Spins (4.1.5) nicht erhalten. Die berücksichtigten Erwartungswerte seien, um die Rechnung zu vereinfachen, alle reell. Ebenfalls soll der resultierende Hamiltonoperator symmetrisch bezüglich der Indizes 1 und 2 sein sowie unter Vertauschung der Bosonen von Typ a mit Typ b . Somit bleiben vier Arten von Erwartungswerten χ_i über, welche selbstkonsistent bestimmt werden müssen

$$\chi_0 = \langle a_1^\dagger a_1 \rangle = \langle b_1^\dagger b_1 \rangle = \langle a_2^\dagger a_2 \rangle = \langle b_2^\dagger b_2 \rangle \quad (4.2.30a)$$

$$\chi_1 = \langle a_1^\dagger a_2^\dagger \rangle = \langle a_1 a_2 \rangle = \langle b_1^\dagger b_2^\dagger \rangle = \langle b_1 b_2 \rangle \quad (4.2.30b)$$

$$\chi_2 = \langle a_1^\dagger b_2 \rangle = \langle a_2^\dagger b_1 \rangle = \langle a_1 b_2^\dagger \rangle = \langle a_2 b_1^\dagger \rangle \quad (4.2.30c)$$

$$\chi_3 = \langle a_1^\dagger b_1^\dagger \rangle = \langle a_1 b_1 \rangle = \langle a_2^\dagger b_2^\dagger \rangle = \langle a_2 b_2 \rangle \quad . \quad (4.2.30d)$$

Der sich durch die Molekularfeld-Näherung ergebende Hamiltonoperator besitzt die Form

$$\begin{aligned}
 H_{b,U}^{\text{MF}} = & \Lambda_1 \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 \right) \\
 & + \Lambda_2 \left(a_1^\dagger b_2 + a_2^\dagger b_1 + a_1 b_2^\dagger + a_2 b_1^\dagger \right) \\
 & + \Gamma_1 \left(a_1^\dagger a_2^\dagger + b_1^\dagger b_2^\dagger + a_1 a_2 + b_1 b_2 \right) \\
 & + \Gamma_2 \left(a_1^\dagger b_1^\dagger + a_2^\dagger b_2^\dagger + a_1 b_1 + a_2 b_2 \right) \\
 & + \Omega \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.2.31}$$

wobei die auftretenden Faktoren Λ_1 , Λ_2 , Γ_1 , Γ_2 und Ω definiert sind durch

$$\Lambda_1 = -\frac{J}{2}\chi_0 + U(6\chi_0 - 4S + 1) \tag{4.2.32a}$$

$$\Lambda_2 = -\frac{J}{2}\chi_2 \tag{4.2.32b}$$

$$\Gamma_1 = -J\chi_1 \tag{4.2.32c}$$

$$\Gamma_2 = 2U\chi_3 \tag{4.2.32d}$$

$$\Omega = J(\chi_0^2 + 2\chi_1^2 + \chi_2^2 + S^2) + U(8S^2 - 12\chi_0^2 - 4\chi_3^2) \quad . \tag{4.2.32e}$$

Um den Hamiltonoperator (4.2.31) zu diagonalisieren, werden zunächst neue bosonischen Operatoren a_+ , a_- , b_+ und b_- durch

$$\begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{4.2.33a}$$

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{4.2.33b}$$

definiert. Der Hamiltonoperator (4.2.31) nimmt mit Hilfe dieser neuen bosonischen Operatoren die Form

$$H_{b,U}^{\text{MF}} = H_+ + H_- + \Omega \tag{4.2.34}$$

an. Die Operatoren H_+ und H_- sind hierbei gegeben durch

$$H_\pm = \Lambda_\pm \left(a_\pm^\dagger a_\pm + b_\pm^\dagger b_\pm \right) + \Gamma_\pm \left(a_\pm^\dagger b_\pm^\dagger + a_\pm b_\pm \right) \tag{4.2.35}$$

mit

$$\Lambda_\pm = \Lambda_1 \pm \Lambda_2 \tag{4.2.36a}$$

$$\Gamma_\pm = \Gamma_1 \pm \Gamma_2 \quad . \tag{4.2.36b}$$

Operatoren der Struktur von (4.2.35) wurden schon in Abschnitt 4.2.1 betrachtet. Sie können also durch eine entsprechende Bogoliubov-Transformation (vgl. Abschnitt A.2.1) diagonalisiert werden.

$$\begin{pmatrix} \alpha_\pm \\ \beta_\pm^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta_\pm & -\sinh \theta_\pm \\ -\sinh \theta_\pm & \cosh \theta_\pm \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\pm \\ b_\pm^\dagger \end{pmatrix} \tag{4.2.37}$$

Tabelle 4.1: Lösungen des nichtlinearen Gleichungssystems (4.2.41)

| | θ_+ | θ_- | U |
|----------|--|--|--------------------------|
| Lösung A | $\pm \operatorname{arsinh}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)$ | $\pm \operatorname{arsinh}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)$ | $\frac{5}{8}J$ |
| Lösung B | $\pm \operatorname{arsinh}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)$ | $\mp \operatorname{arsinh}\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)$ | $\frac{1}{16}J$ |
| Lösung C | $\approx 1,048 + 0,089i$ | $\approx 0,329 - 0,810i$ | $\approx 0,414 - 0,091i$ |

Erfüllen die beiden Winkel θ_+ und θ_- die Bedingung

$$\tanh(2\theta_{\pm}) = -\frac{\Gamma_{\pm}}{\Lambda_{\pm}} \quad , \quad (4.2.38)$$

so erhält man den diagonalen Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H_{b,U}^{\text{MF}} = & (\Lambda_+ \cosh 2\theta_+ + \Gamma_+ \sinh 2\theta_+) (\alpha_+^\dagger \alpha_+ + \beta_+^\dagger \beta_+) \\ & + (\Lambda_- \cosh 2\theta_- + \Gamma_- \sinh 2\theta_-) (\alpha_-^\dagger \alpha_- + \beta_-^\dagger \beta_-) \\ & + 2\Lambda_+ \sinh^2 \theta_+ + 2\Lambda_- \sinh^2 \theta_- - \Gamma_+ \sinh 2\theta_+ - \Gamma_- \sinh 2\theta_- + \Omega \quad . \end{aligned} \quad (4.2.39)$$

Die Erwartungswerte χ_i können nun bezüglich des neuen Vakuums $|G\rangle$ der Operatoren α_{\pm} und β_{\pm} berechnet werden. Dazu werden die Operatoren a_1, a_2, b_1 und b_2 durch die neuen Operatoren $\alpha_+, \alpha_-, \beta_+$ und β_- dargestellt. Man erhält

$$\chi_0 = \frac{1}{2} (\sinh^2 \theta_+ + \sinh^2 \theta_-) \quad (4.2.40a)$$

$$\chi_1 = \frac{1}{2} (\sinh \theta_+ \cosh \theta_+ + \sinh \theta_- \cosh \theta_-) \quad (4.2.40b)$$

$$\chi_2 = \frac{1}{2} (\sinh^2 \theta_+ - \sinh^2 \theta_-) \quad (4.2.40c)$$

$$\chi_3 = \frac{1}{2} (\sinh \theta_+ \cosh \theta_+ - \sinh \theta_- \cosh \theta_-) \quad . \quad (4.2.40d)$$

Erneut soll nur noch der Fall $S = \frac{1}{2}$ betrachtet werden. Wie schon in Abschnitt 4.2.2 soll der Parameter U so gewählt werden, dass die Nebenbedingung (3.4.2) im Mittel erfüllt ist. Man erhält dadurch ein nichtlineares Gleichungssystem

$$\chi_0 = \frac{1}{2} (\sinh^2 \theta_+ + \sinh^2 \theta_-) = \frac{1}{2} \quad (4.2.41a)$$

$$\frac{\Gamma_+}{\Lambda_+} = -\tanh 2\theta_+ \quad (4.2.41b)$$

$$\frac{\Gamma_-}{\Lambda_-} = -\tanh 2\theta_- \quad (4.2.41c)$$

in den drei Unbekannten θ_+, θ_- und U . Mit Hilfe des Computeralgebra Systems MAPLE 9.5 können drei mögliche unterschiedliche Lösungen gefunden werden, die in Tabelle 4.1 aufgelistet sind.

Verwendet man Lösung A, so sind die Erwartungswerte χ_2 und χ_3 gemäß (4.2.40) gleich null. Dies sind gerade die Erwartungswerte, welche im Vergleich mit den vorherigen Abschnitten nun zusätzlich berücksichtigt wurden. Lösung A entspricht somit der Molekularfeld-Näherung aus Abschnitt 4.2.2. Die Lösung C ist aufgrund der imaginären Anteile als unphysikalisch zu betrachten. Somit

bleibt als einzige neue mögliche Variante die Lösung B zu untersuchen. Diese Lösung ist ebenfalls selbstkonsistent und man erhält eine Grundzustandsenergie E_0 von

$$\boxed{E_0 = \langle H_{b,U}^{\text{MF}} \rangle = \langle H_{b,U} \rangle = 6U = \frac{3}{8}J} \quad . \quad (4.2.42)$$

Dieser Wert stimmt mit dem Wert für die Grundzustandsenergie aus Abschnitt 4.2.2 überein. Eine Verbesserung der Grundzustandsenergie wurde somit nicht erzielt. Die ‘‘Anregungsenergien’’ ω_{\pm} sind gegeben durch

$$\boxed{\omega = \omega_{\pm} = (\Lambda_{\pm} \cosh 2\theta_{\pm} + \Gamma_{\pm} \sinh 2\theta_{\pm}) = -\frac{1}{16}J} \quad . \quad (4.2.43)$$

Aufgrund des Minuszeichens liegen die Einteilchenenergien unterhalb der Vakuumsenergie. Jedoch sollte die Molekularfeld-Rechnung so durchgeführt werden, dass das Vakuum $|G\rangle$ gerade den Grundzustand, also den energetisch tiefstliegenden Zustand, näherungsweise beschreibt. Somit ist diese selbstkonsistente Lösung auch zu verwerfen. Interessanterweise gilt bei dieser Variante der Molekularfeld-Rechnung, dass der Erwartungswert des Operators H_x (4.2.19) null ist und somit $\langle H_{0,a} \rangle = \langle H_{0,b} \rangle$ gilt. Führt man dieselbe Rechnung für den Hamiltonoperator $H_{a,U}$ durch, so erhält man $U = 0$, woraus $E_0 = \omega = 0$ folgt.

Insgesamt kann somit durch die Berücksichtigung aller Erwartungswerte, deren Operatoren die z -Komponente des Gesamtspins (4.1.5) erhalten, keine Verbesserung der Ergebnisse erzielt werden.

4.3 Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen

In diesem Abschnitt soll für den Hamiltonoperator

$$H_{b,\lambda,U} = H_{0,b} + H_{\lambda} + H_U \quad (4.3.1)$$

exemplarisch versucht werden, die in den vorherigen Abschnitten 4.2.1 und 4.2.2 durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen mit Hilfe der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern. Insbesondere ist man dabei neben der besseren Bestimmung der Grundzustandsenergie daran interessiert, den Zweiteilchen-Unterraum zu beschreiben. Dazu werden zunächst die Terme, die bei den Molekularfeld-Näherungen vernachlässigt wurden, wieder berücksichtigt. Es werden somit alle Operatoren des Hamiltonoperators $H_{b,\lambda,U}$ wie bei den Molekularfeld-Rechnungen aus den Abschnitten 4.2.1 und 4.2.2 gemäß

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & \sinh \theta \\ \sinh \theta & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (4.3.2a)$$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh \theta & \sinh \theta \\ \sinh \theta & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2^{\dagger} \end{pmatrix} \quad . \quad (4.3.2b)$$

transformiert und normalgeordnet. Der bei der Transformation (4.2.8) auftretende Winkel φ wurde dabei null gesetzt, so dass die Koeffizienten des Hamiltonoperators reell bleiben. Die Normalordnung wird so durchgeführt, dass alle teilchenerzeugenden Operatoren einer Sorte Bosonen links von den entsprechenden teilchenvernichtenden Operatoren stehen. Durch die Transformation (4.3.2) und die

anschließende Normalordnung erhält der Hamiltonoperator (4.3.1) die Form

$$\begin{aligned}
 H_{b,\lambda,U} = & h_{0,0} \\
 & + h_{1,1} \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 + \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1 + \beta_2^\dagger \beta_2 \right) \\
 & + h_{0,2} \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{2,2}^a \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger \alpha_1 \alpha_1 + \alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2 \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1^\dagger \beta_1 \beta_1 + \beta_2^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2 \beta_2 \right) \\
 & + h_{2,2}^b \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1 \beta_2^\dagger \beta_2 \right) \\
 & + h_{2,2}^c \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 \beta_1^\dagger \beta_1 + \alpha_2^\dagger \alpha_2 \beta_2^\dagger \beta_2 \right) \\
 & + h_{2,2}^d \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1 \beta_2^\dagger \beta_2 + \alpha_2^\dagger \alpha_2 \beta_1^\dagger \beta_1 \right) \\
 & + h_{2,2}^e \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_1 \beta_2 + \alpha_1 \alpha_2 \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger \right) \\
 & + h_{1,3}^a \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger \alpha_1 \alpha_2^\dagger + \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1^\dagger \beta_1 \beta_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2 + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{1,3}^b \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_1^\dagger \beta_1 + \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2 + \alpha_1^\dagger \alpha_1 \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger + \alpha_2^\dagger \alpha_2 \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{0,4}^a \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{0,4}^b \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad .
 \end{aligned} \tag{4.3.3}$$

Ein Koeffizient, der mit $h_{i,j}$ bezeichnet wird, steht entweder vor einem oder mehreren Termen von Operatoren, welche entweder aus i Erzeugern und j Vernichtern oder aus j Erzeugern und i Vernichtern bestehen. Die Gesamtzahl an Operatoren pro Term ist demnach $i + j$ und die Teilchenzahl wird um $|i - j|$ verändert. Explizit sind die Koeffizienten $h_{i,j}$ für den Hamiltonoperator $H_{b,\lambda,U}$ gegeben durch

$$\begin{aligned}
 h_{0,0}(0) = & -J \left(2 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta + \sinh^4 \theta - S^2 \right) + \lambda \left(4 \sinh^2 \theta - 2 \right) \\
 & + U \left(2 + 4 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta + 8 \sinh^4 \theta - 8 \sinh^2 \theta \right)
 \end{aligned} \tag{4.3.4a}$$

$$\begin{aligned}
 h_{1,1}(0) = & -J \left(\frac{5}{2} \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta + \frac{1}{2} \sinh^4 \theta \right) + \lambda \left(\cosh^2 \theta + \sinh^2 \theta \right) \\
 & + U \left(\cosh^4 \theta - 2 \cosh^2 \theta + 6 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta + 5 \sinh^4 \theta - 2 \sinh^2 \theta \right)
 \end{aligned} \tag{4.3.4b}$$

$$\begin{aligned}
 h_{0,2}(0) = & -J \left(\cosh^3 \theta \sinh \theta + 2 \cosh \theta \sinh^3 \theta \right) + \lambda \left(2 \cosh \theta \sinh \theta \right) \\
 & + U \left(2 \cosh^3 \theta \sinh \theta + 10 \cosh \theta \sinh^3 \theta - 4 \cosh \theta \sinh \theta \right)
 \end{aligned} \tag{4.3.4c}$$

$$h_{2,2}^a(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(\cosh^4 \theta + \sinh^4 \theta \right) \tag{4.3.4d}$$

$$h_{2,2}^b(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^4 \theta + \frac{1}{2} \sinh^4 \theta + \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(8 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) \tag{4.3.4e}$$

$$h_{2,2}^c(0) = -J \left(\cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(2 \cosh^4 \theta + 2 \sinh^4 \theta \right) \tag{4.3.4f}$$

$$h_{2,2}^d(0) = -J \left(\cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(4 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) \tag{4.3.4g}$$

$$h_{2,2}^e(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^4 \theta + \frac{1}{2} \sinh^4 \theta \right) + U \left(4 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) \tag{4.3.4h}$$

$$h_{1,3}^a(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^3 \theta \sinh \theta + \frac{1}{2} \cosh \theta \sinh^3 \theta \right) + U \left(2 \cosh^3 \theta \sinh \theta + 2 \cosh \theta \sinh^3 \theta \right) \quad (4.3.4i)$$

$$h_{1,3}^b(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^3 \theta \sinh \theta + \frac{1}{2} \cosh \theta \sinh^3 \theta \right) + U \left(2 \cosh^3 \theta \sinh \theta + 2 \cosh \theta \sinh^3 \theta \right) \quad (4.3.4j)$$

$$h_{0,4}^a(0) = -J \left(\frac{1}{2} \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(2 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) \quad (4.3.4k)$$

$$h_{0,4}^b(0) = -J \left(\cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) + U \left(4 \cosh^2 \theta \sinh^2 \theta \right) \quad (4.3.4l)$$

Wählt man nun die Parameter θ , λ und U so, dass sie mit den aus den Molekularfeld-Rechnungen bestimmten Werten aus Abschnitt 4.2.1 bzw. 4.2.2 übereinstimmen, und vernachlässigt sämtliche quartischen Terme, also alle Koeffizienten $h_{i,j}$ mit $i+j=4$, so ergeben sich gerade die Molekularfeld-Hamiltonoperatoren aus Abschnitt 4.2.1 bzw. 4.2.2. Der Hamiltonoperator (4.3.3) besitzt nach der Transformation Terme, welche die Teilchenzahl verändern, und verbindet dadurch Unterräume mit unterschiedlichen Teilchenzahlen. Mit Hilfe des von Knetter und Uhrig vorgeschlagenen Generators (2.4.4) soll nun durch eine kontinuierliche unitäre Transformation ein effektiver teilchenzahlerhaltender Hamiltonoperator bestimmt werden. Der Generator η kann direkt anhand der Form des Hamiltonoperators (4.3.3) bestimmt werden und ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \eta = & h_{0,2} \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger - \text{h.c.} \right) \\ & + h_{1,3}^a \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger \alpha_1 \alpha_2^\dagger + \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2 + \beta_1^\dagger \beta_1^\dagger \beta_1 \beta_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2 - \text{h.c.} \right) \\ & + h_{1,3}^b \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_1^\dagger \beta_1 + \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2 + \alpha_1^\dagger \alpha_1 \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger + \alpha_2^\dagger \alpha_2 \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger - \text{h.c.} \right) \\ & + h_{0,4}^a \left(\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger \beta_2^\dagger - \text{h.c.} \right) \\ & + h_{0,4}^b \left(\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger - \text{h.c.} \right) \quad (4.3.5) \end{aligned}$$

Bildet man nun mit diesem Generator den Kommutator $[\eta, H]$ und ordnet anschließend die entstehenden Terme normal, um gemäß (2.1.5) die Flussgleichungen aufzustellen, so entstehen neue Terme welche im Ausgangshamiltonoperator (4.3.3) nicht vorhanden sind. Jedoch bestehen diese neuen Terme alle aus sechs Operatoren und beschreiben aufgrund der zuvor durchgeführten Normalordnung Prozesse, in denen zumindest drei Teilchen beteiligt sein müssen. Ist man an Zuständen mit tiefliegenden Energieeigenwerten interessiert, so sollten solche Terme von geringerer Bedeutung sein. Im Folgenden sollen sie daher vernachlässigt werden. Aufgrund dieser Näherung ist auch die zuvor durchgeführte Molekularfeld-Rechnung wichtig, um einen möglichst guten Startpunkt zu bestimmen. Trunkiert man die Flussgleichungen wie beschrieben, so erhält man gemäß (2.1.5)

$$\partial_t h_{0,0} = -4h_{0,2}h_{0,2} - 16h_{0,4}^a h_{0,4}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,4}^b \quad (4.3.6a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t h_{1,1} = & -2h_{0,2}h_{0,2} - 4h_{1,3}^a h_{1,3}^a - 2h_{1,3}^b h_{1,3}^b - 16h_{0,4}^a h_{0,4}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,4}^b - 8h_{0,2}h_{1,3}^a \\ & - 4h_{0,2}h_{1,3}^b \quad (4.3.6b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_t h_{0,2} = & -2h_{0,2}h_{1,1} - h_{0,2}h_{2,2}^e - 8h_{0,2}h_{0,4}^a - 2h_{0,2}h_{0,4}^b - 16h_{0,4}^a h_{1,3}^a - 4h_{0,4}^b h_{1,3}^b \\ & - h_{0,2}h_{2,2}^b \quad (4.3.6c) \end{aligned}$$

$$\partial_t h_{2,2}^a = -8h_{1,3}^a h_{1,3}^a - 4h_{1,3}^a h_{0,2} - 4h_{0,4}^a h_{0,4}^a - 2h_{1,3}^b h_{1,3}^b \quad (4.3.6d)$$

$$\partial_t h_{2,2}^b = -24h_{1,3}^a h_{1,3}^a - 16h_{1,3}^a h_{0,2} - 4h_{1,3}^b h_{1,3}^b - 32h_{0,4}^a h_{0,4}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,4}^b \quad (4.3.6e)$$

$$\partial_t h_{2,2}^c = -4h_{1,3}^b h_{1,3}^b - 8h_{1,3}^b h_{0,2} - 16h_{1,3}^a h_{1,3}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,4}^b \quad (4.3.6f)$$

$$\partial_t h_{2,2}^d = -4h_{1,3}^b h_{1,3}^b - 8h_{1,3}^b h_{0,2} - 16h_{1,3}^a h_{1,3}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,4}^b \quad (4.3.6g)$$

4.3 Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen

$$\partial_l h_{2,2}^e = -8h_{1,3}^b h_{1,3}^b - 8h_{1,3}^b h_{0,2} - 16h_{0,4}^a h_{0,4}^b \quad (4.3.6h)$$

$$\begin{aligned} \partial_l h_{1,3}^a = & -2h_{0,2} h_{2,2}^a - 2h_{1,3}^a h_{1,1} - h_{1,3}^b h_{2,2}^e - 2h_{1,3}^a h_{2,2}^b - h_{0,2} h_{2,2}^b - 2h_{1,3}^a h_{2,2}^b \\ & - 20h_{0,4}^a h_{1,3}^a - 4h_{0,4}^a h_{0,2} - 2h_{0,4}^b h_{1,3}^b \end{aligned} \quad (4.3.6i)$$

$$\begin{aligned} \partial_l h_{1,3}^b = & -h_{0,2} h_{2,2}^c - h_{0,2} h_{2,2}^d - h_{0,2} h_{2,2}^e - 2h_{1,3}^a h_{2,2}^e - 2h_{1,3}^b h_{1,1} - h_{1,3}^b h_{2,2}^c \\ & - h_{1,3}^b h_{2,2}^d - 8h_{0,4}^a h_{1,3}^b - 4h_{0,4}^b h_{1,3}^a - 2h_{0,4}^b h_{0,2} - h_{1,3}^b h_{2,2}^b - 4h_{0,4}^b h_{1,3}^b \end{aligned} \quad (4.3.6j)$$

$$\partial_l h_{0,4}^a = -4h_{0,4}^a h_{1,1} - 4h_{0,4}^a h_{2,2}^a - 4h_{0,4}^a h_{2,2}^b - h_{0,4}^b h_{2,2}^e \quad (4.3.6k)$$

$$\partial_l h_{0,4}^b = -8h_{0,4}^a h_{2,2}^e - 4h_{1,1} h_{0,4}^b - 2h_{2,2}^b h_{0,4}^b - 2h_{2,2}^c h_{0,4}^b - 2h_{2,2}^d h_{0,4}^b \quad (4.3.6l)$$

Die Startwerte der Flussgleichungen (4.3.6) sind gegeben durch (4.3.4) und hängen von den drei Parametern θ , λ und U ab. Der Parameter J wird bei sämtlichen Rechnungen gleich eins gesetzt. Um einen teilchenzahlerhaltenden effektiven Hamiltonoperator zu bestimmen, muss das Anfangswertproblem (4.3.6, 4.3.4) bis zu einem hinreichend großen l -Wert integriert werden. Für die numerische Integration wurde MATHEMATICA 4.1 verwendet und solange nicht anders angegeben bis zu einem l -Wert von 100 gerechnet. Dieser Wert von l ist in fast jedem Fall, indem das Anfangswertproblem konvergiert, ausreichend, um dafür zu sorgen, dass die nicht teilchenzahlerhaltenden Koeffizienten $h_{i,j}$ vernachlässigbar klein sind ($\mathbf{srod} < 10^{-10}$) und man demnach hinreichend nahe an einem Fixpunkt des DGL-Systems (4.3.6) liegt.

Tabelle 4.2: Eigenzustände des Hamiltonoperators $H_{b,\lambda,U}$ nach der unitären Transformation

| Eigenzustand | Eigenwert | S_{ges}^z |
|--|--|--------------------|
| Vakuum | | |
| $ G\rangle$ | $h_{0,0}$ | 0 |
| Einteilcheneigenzustände | | |
| $\alpha_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $\frac{1}{2}$ |
| $\alpha_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $-\frac{1}{2}$ |
| $\beta_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $-\frac{1}{2}$ |
| $\beta_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $\frac{1}{2}$ |
| Zweiteilcheneigenzustände | | |
| $\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger + \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger) G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b + h_{2,2}^e$ | 0 |
| $\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1^\dagger \alpha_2^\dagger - \beta_1^\dagger \beta_2^\dagger) G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b - h_{2,2}^e$ | 0 |
| $\alpha_1^\dagger \beta_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^d$ | 1 |
| $\alpha_2^\dagger \beta_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^d$ | -1 |
| $\alpha_1^\dagger \alpha_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + 2h_{2,2}^a$ | 1 |
| $\alpha_2^\dagger \alpha_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + 2h_{2,2}^a$ | -1 |
| $\beta_1^\dagger \beta_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + 2h_{2,2}^a$ | -1 |
| $\beta_2^\dagger \beta_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + 2h_{2,2}^a$ | 1 |
| $\alpha_1^\dagger \beta_1^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^c$ | 0 |
| $\alpha_2^\dagger \beta_2^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^c$ | 0 |

Sind alle nicht teilchenzahlerhaltenden Terme so klein, dass man sie vernachlässigen kann, so können neben dem Vakuum auch leicht alle Eigenzustände im Einteilchenraum und Zweiteilchenraum bestimmt werden. Diese Eigenzustände des Hamiltonoperators $H_{b,\lambda,U}$ nach der unitären Transformation sind zusammen mit deren Eigenwerten und der jeweiligen z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z in Tabelle 4.2 aufgelistet.

Die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z ist sowohl invariant unter der Bogoliubov-Transformation (4.3.2) als auch unter der kontinuierlichen unitären Transformation, die durch den Generator η (4.3.5) erzeugt wird. Dies liegt daran, dass die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z und der Generator η kommutieren. Die Bogoliubov-Transformation würde durch einen Generator erzeugt werden, welcher nur aus den quadratischen Termen in (4.3.5) bestehen würde, wodurch direkt folgt, dass auch die Bogoliubov-Transformation die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z invariant lässt. Somit kann die in Tabelle 4.2 angegebene z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z einfach durch Gleichung 4.1.5 bestimmt werden, wenn man dabei eins zu eins die alten Operatoren a_1, a_2, b_1 und b_2 durch die neuen Operatoren $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ und β_2 ersetzt.

Man erhält je nach Wahl der Parameter θ, λ und U unterschiedliche Ergebnisse für den effektiven Hamiltonoperator H_{eff} . Die Koeffizienten sind somit ebenfalls nach der Integration bzw. nach der kontinuierlichen unitären Transformation Funktionen der Startparameter θ, λ und U . Wie schon bei den zuvor durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen soll der Parameter λ so gewählt werden, dass nach der kontinuierlichen unitären Transformation

$$\partial_\lambda \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = \partial_\lambda h_{0,0} = 0 \quad (4.3.7)$$

gilt und das Vakuum somit im Mittel die Nebenbedingung (3.4.2) für physikalische Zustände erfüllt. Bei einer exakten Rechnung sollte das Ergebnis nicht von der Wahl des Startparameters θ abhängen. Aufgrund der durchgeführten Trunkierung ist dies allerdings nicht zu erwarten, und es wird allenfalls Stationarität erreicht werden können [Ste81]. Demnach wird der optimale Startpunkt bezüglich θ durch die Gleichung

$$\partial_\theta \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = \partial_\theta h_{0,0} = 0 \quad (4.3.8)$$

bestimmt. Der Parameter U steht vor einem Term, welcher die Nebenbedingung, $C_i^b = 0$ (3.4.2) quadratisch enthält (4.2.20). Sei nun ψ ein beliebiger normierter Eigenzustand zum Hamiltonoperator $H_{b,\lambda,U}$. Betrachtet man den Ausdruck

$$\begin{aligned} \partial_U \langle \psi(U) | H_{b,\lambda,U} | \psi(U) \rangle &= \langle \psi(U) | \left(\partial_U H_{b,\lambda,U} \right) | \psi(U) \rangle \\ &\quad + \left(\partial_U \langle \psi(U) | \right) H_{b,\lambda,U} | \psi(U) \rangle + \langle \psi(U) | H_{b,\lambda,U} \left(\partial_U | \psi(U) \rangle \right) \\ &= \langle \psi(U) | \left(\partial_U H_{b,\lambda,U} \right) | \psi(U) \rangle \\ &\quad + E_{b,\lambda,U}(\psi) \left[\left(\partial_U \langle \psi(U) | \right) | \psi(U) \rangle + \langle \psi(U) | \left(\partial_U | \psi(U) \rangle \right) \right] \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

und verwendet, dass der Zustand $|\psi(U)\rangle$ normiert ist

$$\langle \psi(U) | \psi(U) \rangle = 1 \quad (4.3.10)$$

$$\Rightarrow \partial_U \langle \psi(U) | \psi(U) \rangle = \left(\partial_U \langle \psi(U) | \right) | \psi(U) \rangle + \langle \psi(U) | \left(\partial_U | \psi(U) \rangle \right) = 0 \quad , \quad (4.3.11)$$

so erhält man aufgrund der Hermizität der C_i^b

$$\begin{aligned} \partial_U \langle \psi(U) | H_{b,\lambda,U} | \psi(U) \rangle &= \langle \psi(U) | \left(\partial_U H_{b,\lambda,U} \right) | \psi(U) \rangle \\ &= \sum_i \langle \psi(U) | C_i^b C_i^b | \psi(U) \rangle \\ &= \sum_i \left| C_i^b | \psi(U) \rangle \right|^2 \geq 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

Demnach gilt insbesondere

$$\partial_U \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = \partial_U h_{0,0} \geq 0 \quad . \quad (4.3.13)$$

Für einen physikalischen Zustand, welcher die Nebenbedingung (3.4.2) erfüllt, sollte sogar Gleichheit in Gleichung (4.3.13) gelten. Aufgrund der durchgeführten Trunkierung ist jedoch nicht sicher, ob $\partial_U \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = 0$ wirklich erreicht werden kann. Die Größe $\partial_U \langle H_{b,\lambda,U} \rangle$ stellt aber immerhin ein Maß für die Abweichung von einem physikalischen Zustand dar und sollte daher minimiert werden. Es sei an dieser Stelle bereits darauf hingewiesen, dass in den folgenden Rechnungen sogar die Ungleichung (4.3.13) verletzt wird. Dies lässt sich jedoch dadurch erklären, dass durch die Trunkierung die Unitarität der Transformation wie in Abschnitt 2.5.3 beschrieben verletzt wird.

In den folgenden Abschnitten wird versucht, gemäß der Bedingungen (4.3.7), (4.3.8) und (4.3.13) eine optimale Startparameterwahl für die kontinuierliche unitäre Transformation zu bestimmen, um nach dieser Transformation den exakten Werten für das Heisenberg-Dimer möglichst nahe zu kommen. Im optimalen Fall sollte ein Punkt (λ, θ, U) gefunden werden, in dem alle drei partiellen Ableitungen (4.3.7), (4.3.8) und (4.3.13) verschwinden.

4.3.1 Ergebnisse und Diskussion für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$

In diesem Abschnitt soll zunächst gemäß der Molekularfeld-Rechnung aus Abschnitt 4.2.1 der Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ gewählt werden und ein stationärer Punkt bezüglich des Parameters λ bestimmt werden. In Abbildung 4.1 ist der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der unitären Transformation in Abhängigkeit des Lagrangeparameters λ für $U = 0$ dargestellt.

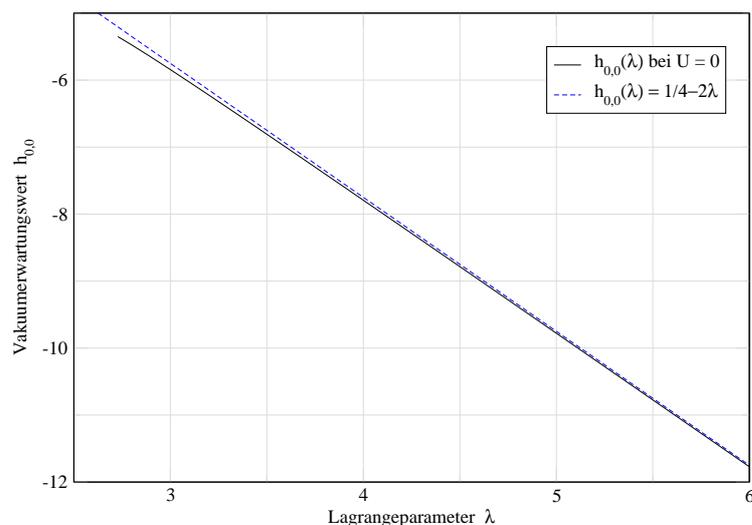


Abbildung 4.1: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ für $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U = 0$. Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters λ für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U = 0$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt. Zusätzlich ist die Gerade $h_{0,0} = \frac{1}{4} - 2\lambda$ eingezeichnet, die dem Erwartungswert des Vakuums $|0\rangle$ von $H_{b,\lambda,U}$ entspricht, bevor irgendeine Transformation der bosonischen Operatoren durchgeführt wurde.

Für diese Parameterwahl von θ und U konvergiert das Anfangswertproblem (4.3.6, 4.3.4) erst ab einem Wert von $\lambda \gtrsim 2,728$ und ein stationärer Punkt bezüglich λ ist *nicht* vorhanden. Die Abbildung 4.1 zeigt ebenfalls den Erwartungswert von $H_{b,\lambda,U}$ bezüglich des Zustandes $|0\rangle$, welcher durch das Vakuum bezüglich der ursprünglichen bosonischen Operatoren a_i und b_i vor jeglicher Transformation ($\theta = 0$) gegeben ist. Dieser Erwartungswert ist vor den Transformationen gegeben durch

$$\langle 0 | H_{b,\lambda,U} | 0 \rangle = \frac{1}{4}J - 2\lambda + 2U \quad . \quad (4.3.14)$$

Für jeden Wert von λ , bei dem die kontinuierliche unitäre Transformation in Abbildung 4.1 konvergiert, liegt dieser Erwartungswert unterhalb des physikalischen Grundzustandes von $-\frac{3}{4}J$. Abbildung 4.1 zeigt deutlich, dass mit steigendem Lagrangeparameter λ der Koeffizient $h_{0,0}$ sich immer mehr der Geraden $\frac{1}{2} - 2\lambda$ nähert, die dem Erwartungswert (4.3.14) des unphysikalischen Zustandes $|0\rangle$ vor jeglicher Transformation entspricht. Daraus kann man schließen, dass die kontinuierliche unitäre Transformation die zuvor durchgeführte Bogoliubov-Transformation wieder rückgängig macht. Dies ist aufgrund der in Abschnitt 2.5.2 beschriebenen Eigenschaft, dass der Knetter-Uhrig-Generator den energetisch tiefstliegenden Zustand zum Vakuum macht, ein durchaus plausibles wenn auch nicht gewünschtes Ergebnis. Es zeigt aber die Wichtigkeit der Stationarität bezüglich λ für den Fall, dass man den Koeffizienten $h_{0,0}$ als physikalischen Grundzustandserwartungswert interpretieren möchte.

Nachdem für $U = 0$ keine physikalisch sinnvollen Ergebnisse erzielt werden konnten, wird im Folgenden die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von λ bei $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ für unterschiedliche Werte von $U > 0$ untersucht.

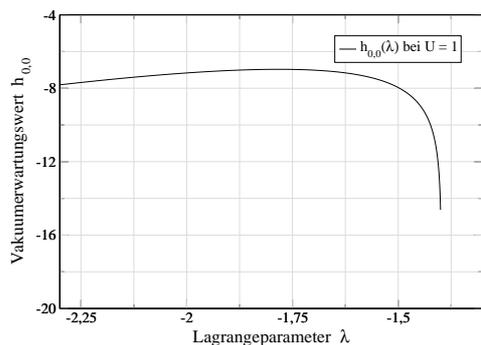
In Abbildung 4.2 ist $h_{0,0}(\lambda)$ für die Werte $U = 0,251$, $U = 0,5$ und $U = 1$ dargestellt. Für die Werte $U = 0,5$ und $U = 1$ können nun deutlich stationäre Punkte bezüglich des Lagrangeparameters λ beobachtet werden. Insbesondere konvergiert die kontinuierliche unitäre Transformation nun zusätzlich für negative Werte von λ . Allerdings existiert für alle betrachteten U -Werte ein mittlerer Bereich, in dem keine Konvergenz zu beobachten ist und demnach in Abbildung 4.2 auch keine Funktionswerte für den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ angegeben sind. Dieser Bereich wird mit sinkendem U immer kleiner, so dass für den Wert $U = 0,251$ nur noch in dem Intervall $I \approx [0,747; 0,753]$ keine Konvergenz erreicht wird. Für diesen Wert von U konvergiert das Gleichungssystem nur sehr langsam, so dass bis $l = 2000$ gerechnet werden muss, um einen Wert $\mathbf{srod} < 10^{-5}$ zu erreichen. Bei höheren U -Werten liegt eine deutlich schnellere Konvergenz vor.

Interessanterweise erhält man für die Parameterwahl $\lambda = 0,75$ und $U = 0,25$ einen Fixpunkt des Anfangswertproblems (4.3.6, 4.3.4) schon vor der kontinuierlichen unitären Transformation, da in diesem Fall alle Startwerte von nicht teilchenzahlerhaltenden Termen null sind. Wählt man $U < 0,25$, so stimmen die Ergebnisse für $h_{0,0}$ qualitativ mit denen bei $U = 0$ in Abbildung 4.1 überein. Man erhält dann ab einem bestimmten Wert $\lambda > 0,75$ eine streng monoton fallende Kurve ohne lokale Extrema. Ebenfalls existiert nur noch ein Bereich, in dem die kontinuierliche unitäre Transformation konvergiert.

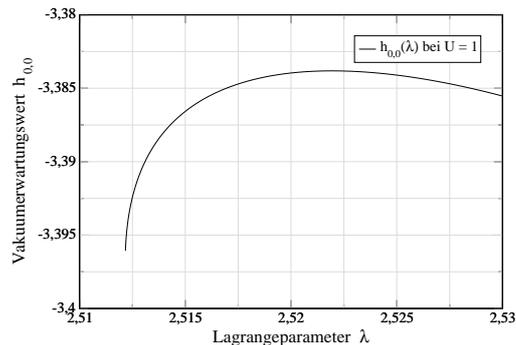
In Tabelle 4.3 sind für die jeweiligen Eigenzustände (vgl. Tabelle 4.2) der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$, die Anregungsenergie $h_{1,1}$ sowie die im Zweiteilchenraum hinzukommenden Energieverschiebungen für die Werte λ_{\max} aufgelistet, bei denen $h_{0,0}$ nach der unitären Transformation bezüglich λ stationär wird. Für den Fall $U = 0,251$, bei dem die Abbildungen 4.2(e) und 4.2(f) keine deutlichen lokalen Maxima besitzen, wird mit λ_{\max} jeweils der äußerste Punkt, an dem noch Konvergenz erreicht werden kann, bezeichnet. Um die qualitative Abhängigkeit der Ergebnisse von U besser beschreiben zu können, enthält die Tabelle 4.3 neben den Ergebnissen für $U = 1$, $U = 0,5$ und $U = 0,251$, für die der Verlauf von $h_{0,0}$ in Abbildung 4.2 dargestellt ist, auch Ergebnisse für die Werte $U = 2$, $U = 0,4$ und $U = 0,3$. Zusätzlich sind die entsprechenden Ergebnisse auch für den Fixpunkt bei $\lambda = 0,75$ und $U = 0,25$ aufgeführt.

Bis auf den Vakuumerwartungswert des Fixpunktes liegen alle aufgeführten Vakuumerwartungswerte $h_{0,0}$ unterhalb der exakten Grundzustandsenergie des Heisenberg-Dimers von $-\frac{3}{4}J$, was vermutlich erneut auf die schon angesprochene Erweiterung des Hilbertraumes zurückzuführen ist. Man sieht, dass die Werte für den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ mit fallendem U -Wert besser werden, so dass die Abweichungen bei $U = 0,251$ etwa 1% betragen. Jedoch steigen die Abweichungen sehr schnell an, so dass bereits für den Wert $U = 0,5$ der relative Fehler bei beiden stationären Punkte größer eins ist.

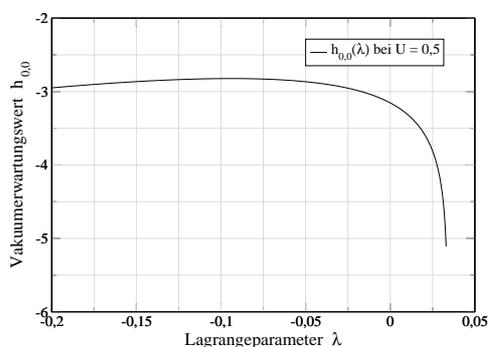
4.3 Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen



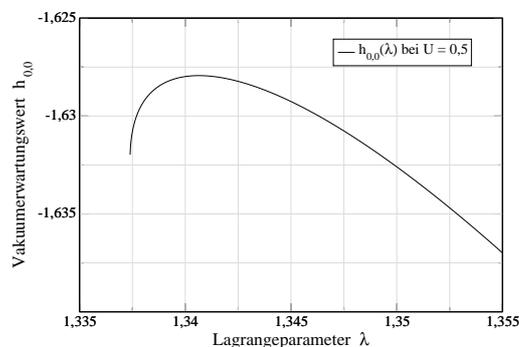
(a)



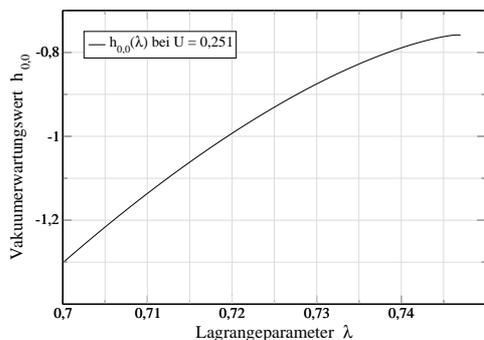
(b)



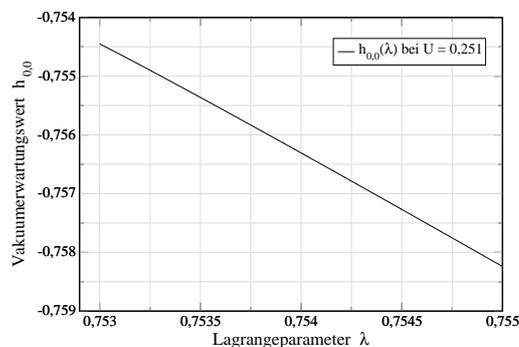
(c)



(d)



(e)



(f)

Abbildung 4.2: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ für $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U \neq 0$. Die Abbildungen zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters λ für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ und $U = 0,251$, $U = 0,5$ und $U = 1$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 2000$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-5}$ galt. (besonders für $U = 0,251$ ist die Konvergenz sehr langsam)

Tabelle 4.3: Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums bei festem Winkel θ

| # Zustände | | 1 | 4 | 1 | 1 | 2 | 4 | 2 | |
|------------|------------------|-----------|-----------|-------------------------|-------------------------|-------------|--------------|-------------|-----------------------|
| U | λ_{\max} | $h_{0,0}$ | $h_{1,1}$ | $h_{2,2}^b + h_{2,2}^e$ | $h_{2,2}^b - h_{2,2}^e$ | $h_{2,2}^d$ | $2h_{2,2}^a$ | $h_{2,2}^c$ | srod |
| 2 | -5,16 | -15,26 | 1,33 | 11,32 | -2,17 | -2,17 | 1,83 | 1,83 | $6,13 \cdot 10^{-29}$ |
| 1 | -1,78 | -6,97 | 0,85 | 4,27 | -0,93 | -0,93 | 1,07 | 1,07 | $1,59 \cdot 10^{-14}$ |
| 0,5 | -0,094 | -2,823 | 0,619 | 0,759 | -0,310 | -0,310 | 0,690 | 0,690 | $4,52 \cdot 10^{-35}$ |
| 0,4 | 0,244 | -1,994 | 0,571 | 0,054 | -0,186 | -0,186 | 0,614 | 0,614 | $3,81 \cdot 10^{-36}$ |
| 0,3 | 0,581 | -1,165 | 0,524 | -0,648 | -0,062 | -0,062 | 0,540 | 0,540 | $1,55 \cdot 10^{-16}$ |
| 0,251 | 0,747 | -0,758 | 0,500 | -0,994 | -0,001 | -0,001 | 0,501 | 0,501 | $3,31 \cdot 10^{-9}$ |
| 2 | 4,884 | -6,896 | 3,439 | -5,487 | -1,336 | -1,336 | 2,664 | 2,664 | $6,74 \cdot 10^{-31}$ |
| 1 | 2,522 | -3,384 | 1,761 | -2,92 | -0,572 | -0,572 | 1,428 | 1,428 | $1,93 \cdot 10^{-41}$ |
| 0,5 | 1,341 | -1,628 | 0,921 | -1,638 | -0,190 | -0,190 | 0,810 | 0,810 | $5,07 \cdot 10^{-22}$ |
| 0,4 | 1,104 | -1,277 | 0,751 | -1,387 | -0,115 | -0,115 | 0,685 | 0,685 | $5,06 \cdot 10^{-14}$ |
| 0,3 | 0,868 | -0,926 | 0,584 | -1,129 | -0,038 | -0,038 | 0,562 | 0,562 | $6,78 \cdot 10^{-10}$ |
| 0,251 | 0,753 | -0,754 | 0,503 | -1,002 | -0,001 | -0,001 | 0,501 | 0,501 | $2,22 \cdot 10^{-6}$ |
| 0,25 | 0,75 | -0,75 | 0,5 | -1 | 0 | 0 | 0,5 | 0,5 | 0 |

Die Anregungsenergien $h_{1,1}$ steigen mit zunehmendem U -Wert an.

Betrachtet man die Koeffizienten, welche im Zweiteilchen-Unterraum hinzukommen (vgl. Tabelle 4.3), so fällt auf, dass $h_{2,2}^b - h_{2,2}^e = h_{2,2}^d$ und $2h_{2,2}^a = h_{2,2}^c$ gilt. Somit kommen gemäß Tabelle 4.2 im Zweiteilchen-Unterraum nur drei unterschiedliche Energieeigenwerte vor

$$E_{2,2}^i = h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b + h_{2,2}^e \quad (4.3.15a)$$

$$\begin{aligned} E_{2,2}^{ii} &= h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b - h_{2,2}^e \\ &= h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^d \end{aligned} \quad (4.3.15b)$$

$$\begin{aligned} E_{2,2}^{iii} &= h_{0,0} + 2h_{1,1} + 2h_{2,2}^a \\ &= h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^c \end{aligned} \quad (4.3.15c)$$

Dabei ist der erste Eigenwert $E_{2,2}^i$ gar nicht, der zweite $E_{2,2}^{ii}$ dreifach und der dritte $E_{2,2}^{iii}$ sechsfach entartet.

Der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ soll den physikalischen Grundzustand beschreiben. Demnach bleiben für das Heisenberg-Dimer noch die drei physikalischen Triplet-Zustände über, die alle den Energieeigenwert $\frac{1}{4}J$ besitzen. Somit scheint gerade der dreifach entartete Eigenwert $E_{2,2}^{ii}$ physikalisch relevant zu sein. Für diesen Eigenwert bewirkt der Zweiteilchenanteil $h_{2,2}^b - h_{2,2}^e$ bzw. $h_{2,2}^d$ immer eine Absenkung der Energie, so dass die zugehörigen Eigenzustände sämtlich gebundene sind.

Tabelle 4.4: Vergleich von $h_{0,0}$ und $E_{2,2}^{\text{ii}}$ mit exakten Werten

| # Zustände | | 1 | 3 | 1 | 6 |
|--------------|------------------------|-----------|-----------------------|----------------------|------------------------|
| U | λ_{max} | $h_{0,0}$ | $E_{2,2}^{\text{ii}}$ | $E_{2,2}^{\text{i}}$ | $E_{2,2}^{\text{iii}}$ |
| 2 | -5,16 | -15,26 | -14,77 | -1,28 | -10,77 |
| 1 | -1,78 | -6,97 | -6,20 | -1 | -4,2 |
| 0,5 | -0,094 | -2,823 | -1,895 | -0,826 | -0,895 |
| 0,4 | 0,244 | -1,994 | -1,038 | -0,798 | -0,238 |
| 0,3 | 0,581 | -1,165 | -0,179 | -0,765 | 0,423 |
| 0,251 | 0,747 | -0,758 | 0,241 | -0,752 | 0,743 |
| 2 | 4,884 | -6,896 | -1,354 | -5,505 | 2,646 |
| 1 | 2,522 | -3,384 | -0,434 | -2,782 | 1,566 |
| 0,5 | 1,341 | -1,628 | 0,024 | -1,424 | 1,024 |
| 0,4 | 1,104 | -1,277 | 0,110 | -1,162 | 0,910 |
| 0,3 | 0,868 | -0,926 | 0,204 | -0,887 | 0,804 |
| 0,251 | 0,753 | -0,754 | 0,250 | -0,750 | 0,753 |
| 0,25 | 0,75 | -0,75 | 0,25 | -0,75 | 0,75 |
| Exakter Wert | | -0,75 | 0,25 | | |

In Tabelle 4.4 sind der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$, der Energieeigenwert $E_{2,2}^{\text{ii}}$ und die exakten Energieeigenwerte für das Heisenberg-Dimer dargestellt. Zusätzlich sind die Energieeigenwerte $E_{2,2}^{\text{i}}$ und $E_{2,2}^{\text{iii}}$ aufgeführt.

Betrachtet man den Fixpunkt bei $\lambda = 0,75$ und $U = 0,25$, so treten die Energieeigenwerte der physikalischen Zustände des Heisenberg-Dimers exakt auf. Der Vakuumerwartungswert, den man als physikalischen Grundzustand interpretieren möchte, hat den Wert $-0,75$, und der dreifach entartete Eigenwert $E_{2,2}^{\text{ii}}$ liefert gerade den Wert $0,25$ der physikalischen Tripletzustände. Allerdings ist der Eigenwert $E_{2,2}^{\text{i}}$ ebenfalls gleich $-0,75$. Dieser Eigenwert muss jedoch bei der gegebenen Parameterwahl zweimal vorkommen, da neben dem physikalischen Zustand auch der unphysikalische Zustand $|0\rangle$ gemäß (4.3.14) diesen Wert liefert. Die Eigenwerte der Einteilchenzustände sind am Fixpunkt alle $-0,25$ und liegen somit noch unterhalb der Eigenwerte der physikalischen Tripletzustände. Um zu verhindern, dass unphysikalische Zustände energetisch tiefer liegen als die physikalischen Zustände, müsste der Wert von U erhöht werden. Dies führt allerdings gemäß der in Tabelle 4.3 und Tabelle 4.4 aufgeführten Werte insbesondere für größere U -Werte zu erheblichen Abweichungen von den physikalischen Eigenwerten.

Für den betrachteten Winkel $\theta = \text{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ kann demnach *nicht* erreicht werden, dass die physikalisch relevanten Energieeigenwerte unterhalb der unphysikalischen Energieeigenwerte liegen und in

guter Näherung mit den exakten Werten übereinstimmen.

Zuletzt soll in diesem Abschnitt noch für den Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter U nach der unitären Transformation für unterschiedliche Werte λ untersucht werden. Die berechneten Ergebnisse sind jeweils für den Bereich, in dem die kontinuierliche unitäre Transformation konvergiert, in Abbildung 4.3 dargestellt. Erneut liegen alle

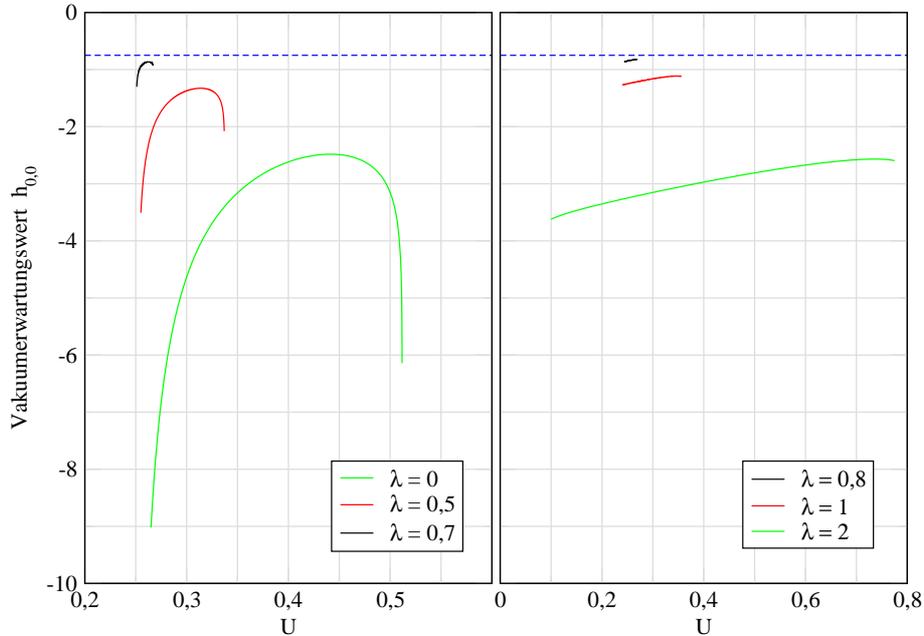


Abbildung 4.3: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter U für $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$. Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters U für unterschiedliche Werte λ bei dem Molekularfeld-Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt. Zusätzlich ist die Gerade $h_{0,0} = -\frac{3}{4}$ eingezeichnet (blau), die dem Erwartungswert des exakten physikalischen Grundzustandes des Heisenberg-Dimers entspricht.

berechneten Werte für $h_{0,0}$ unterhalb des exakten physikalischen Wertes der Grundzustandenergie des Heisenberg-Dimers.

Bemerkenswert ist, dass es Bereiche gibt, in denen die Ableitung $\partial_U h_{0,0}$ negativ ist und somit die Ungleichung (4.3.13) verletzt wird. Dies lässt sich, wie schon zuvor erwähnt, nur aufgrund der durchgeführten Trunkierung erklären. Wieder verbessern sich die Ergebnisse für $h_{0,0}$, wenn man sich dem Fixpunkt bei $\lambda = 0,75$ und $U = 0,25$ nähert, wobei sich jedoch ebenfalls der Bereich, in dem die kontinuierliche unitäre Transformation konvergiert, verkleinert. Eine Verbesserung zu den zuvor bestimmten Werten kann durch die Betrachtung von $h_{0,0}$ als Funktion von U nicht erzielt werden.

4.3.2 Ergebnisse und Diskussion für beliebige Winkel θ

Nachdem im vorigen Abschnitt das Anfangswertproblem (4.3.6, 4.3.4) nur für den Winkel $\theta = \operatorname{arsinh}\left(\frac{1}{2}\right)$ betrachtet wurde, soll nun das Verhalten des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ für unter-

schiedliche Werte von θ untersucht werden. Gemäß Gleichung (4.3.8) sollen dabei, wenn möglich, die Startparameter λ , U und θ so gewählt werden, dass neben den beiden auch schon im vorigen Abschnitt untersuchten Bedingungen (4.3.7) und (4.3.13) für λ und U zusätzlich der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ stationär bezüglich θ wird.

In Abbildung 4.4 ist der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ für $U = 0$ als Funktion des Winkels θ und des Lagrangeparameters λ nach der kontinuierlichen unitären Transformation dargestellt. Für jeden

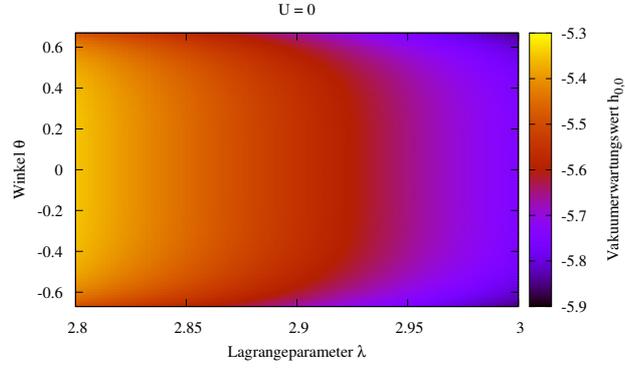
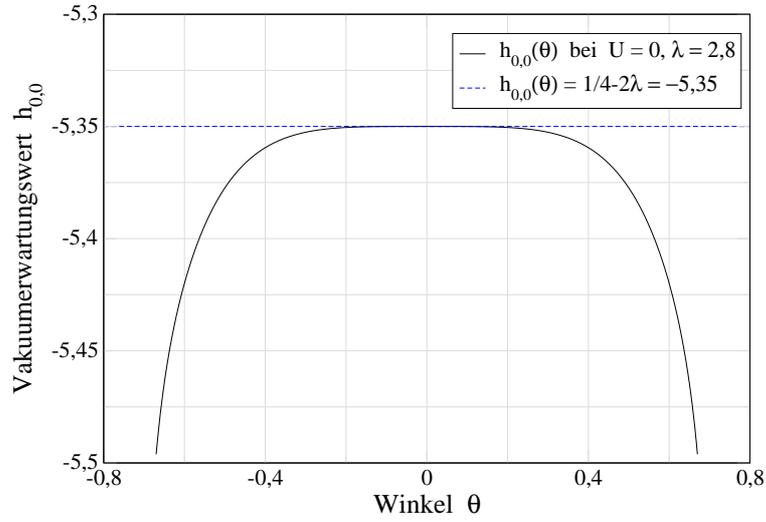


Abbildung 4.4: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 0$. Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Parameter λ und θ bei $U = 0$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt.

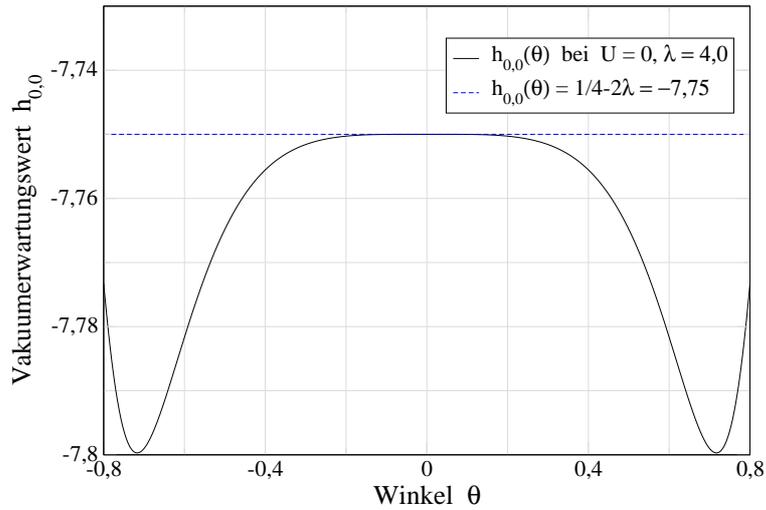
in Abbildung 4.4 aufgeführten Wert λ wird die Funktion stationär bezüglich θ genau bei $\theta = 0$. Stationäre Punkte bezüglich λ sind nicht vorhanden. Neben dem in Abbildung 4.4 gezeigten Wertebereich für λ wurde ebenfalls die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ von θ für Werte $\lambda < 2,8$ untersucht. In diesem Fall muss jedoch, damit die kontinuierliche unitäre Transformation konvergiert, der Winkelbereich im Vergleich zu Abbildung 4.4 verkleinert werden. Dort findet man stationäre Punkte bezüglich des Winkels θ nur bei $\theta = 0$. Wählt man $\theta = 0$, so wird allerdings gar keine Bogoliubov-Transformation durchgeführt. Da der Hamiltonoperator $H_{b,\lambda,U}$ jedoch ohne Bogoliubov-Transformation teilchenzahlerhaltend ist, wird auch keine kontinuierliche unitäre Transformation durchgeführt, da man sich bereits für $l = 0$ an einem Fixpunkt des Anfangswertproblems (4.3.6, 4.3.4) befindet. Man würde demnach für $\theta = 0$ den Hamiltonoperator $H_{b,\lambda,U}$ gar nicht transformieren, und die physikalischen Zustände lägen nach wie vor alle im Zweiteilchen-Unterraum.

Dass der Winkelbereich, in dem Konvergenz erzielt werden kann, von der Wahl des Lagrangeparameters λ abhängt, ist in Abbildung 4.5 dargestellt, welche die Winkelabhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ bei $U = 0$ sowohl für $\lambda = 2,8$ (Abbildung 4.5(a)) als auch für $\lambda = 4$ (Abbildung 4.5(b)) zeigt. Für $\lambda = 2,8$ besitzt $h_{0,0}$ genau ein Maximum bei $\theta = 0$ und ansonsten keine weiteren lokalen Extrema. Dies gilt auch für alle Werte $\lambda < 2,8$. Wie schon erwähnt ist jedoch für $\theta = 0$ der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ physikalisch irrelevant. Vergrößert man den Parameter λ , so lassen sich zusätzlich Minima bezüglich θ für $h_{0,0}$ finden. Dies ist in Abbildung 4.5(b) für den Wert $\lambda = 4,0$ dargestellt. Der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ besitzt bei diesen Minima einen Wert von $-7,8$ und ist damit ca. um einen Faktor zehn kleiner als der physikalische Grundzustand des Heisenberg-Dimers. Daher sind diese Minima wohl ebenfalls als unphysikalisch zu betrachten. Wie schon im vorigen Abschnitt, in dem der Winkel θ stets festgehalten wurde, scheint eine Wahl $U > 0$ notwendig zu sein, möchte man erreichen, dass durch $h_{0,0}$ der physikalische Grundzustandserwartungswert des Heisenberg-Dimers beschrieben wird.

Wählt man $U > 0$, so wird die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Winkel θ und dem Lagrangeparameter λ komplizierter. Dazu sollen im Folgenden zwei Beispiele betrachtet werden.



(a)



(b)

Abbildung 4.5: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter θ bei $U = 0$ für $\lambda = 2,8$ und $\lambda = 4,0$. Die beiden Abbildungen zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters θ für $U = 0$ für $\lambda = 2,8$ bzw. $\lambda = 4,0$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt. Ebenfalls ist jeweils der unphysikalische Erwartungswert (4.3.14) dargestellt (blaue Gerade).

Tabelle 4.5: Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums bei variablen Winkel θ

| # Zustände | | | 1 | 4 | 1 | 1 | 2 | 4 | 2 | |
|------------|----------------------|-----------|-----------|-----------|-------------------------|-------------------------|-------------|--------------|-------------|-----------------------|
| U | θ | λ | $h_{0,0}$ | $h_{1,1}$ | $h_{2,2}^b + h_{2,2}^c$ | $h_{2,2}^b - h_{2,2}^c$ | $h_{2,2}^d$ | $2h_{2,2}^a$ | $h_{2,2}^c$ | srod |
| 1 | $1.1 \cdot 10^{-6}$ | -13 | -0,806 | 4,564 | 19,899 | -8,125 | -8,125 | -6,125 | -6,125 | $4,96 \cdot 10^{-32}$ |
| 0,286 | $2,22 \cdot 10^{-7}$ | 0,0015 | -0,752 | 0,716 | 0,138 | -0,432 | -0,432 | 0,140 | 0,140 | $1,59 \cdot 10^{-14}$ |

Zunächst ist in Abbildung 4.6 die Situation für den Fall $U = 1$ dargestellt. Betrachtet man die oberste Abbildung 4.6(a), so liegen die größten Werte des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ in der Gegend der kleinsten eingezeichneten Werte für λ und ungefähr im Intervall von $\theta = 0,025$ bis $\theta = 0,3$. Verkleinert man sowohl den Lagrangeparameter λ als auch den Winkel θ , so gelangt man zur mittleren Abbildung 4.6(b). Hier sieht man deutlich, dass der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ in etwa die Form eines Bergrückens besitzt. Dieser steigt in Richtung links unten zu kleineren Winkeln θ und kleineren Werten des Lagrangeparameters λ leicht an. Folgt man diesem Anstieg, so gelangt man schließlich zur untersten Abbildung, in der die selbe Situation gegeben ist. Es existiert nach wie vor ein Anstieg in Richtung kleiner Winkel θ sowie kleinerer λ -Werte. Ein stationärer Punkt bezüglich λ und θ wird somit nicht erreicht.

Ein großes Problem bei der Erstellung dieser Abbildungen besteht darin, dass immer Punkte in der θ - λ -Ebene existieren, für die die Flussgleichung für zu große Werte von l divergiert. Daher wurden sämtliche kontinuierlichen unitären Transformationen nur bis zu einem Wert l_{eff} berechnet, bei dem die Größe

$$\mathbf{srod}_{\text{eff,max}} = \max_{\theta, \lambda} \left(\mathbf{srod}(l = l_{\text{eff}}) \right) \quad (4.3.16)$$

möglichst klein war. Als Vergleichswert dazu wurde die Größe

$$\mathbf{srod}_{0,\text{min}} = \min_{\theta, \lambda} \left(\mathbf{srod}(l = 0) \right) \quad (4.3.17)$$

betrachtet. Ist nun die Größe $\mathbf{srod}_{\text{eff,max}}$ kleiner als die Größe $\mathbf{srod}_{0,\text{min}}$, so wurde für jeden Punkt in der betrachteten θ - λ -Ebene eine Transformation durchgeführt, so dass die nicht teilchenzahlerhaltenden Terme bei $l = l_{\text{eff}}$ einen kleineren Beitrag liefern als beim Startpunkt $l = 0$. Dadurch wird zumindest ein effektiver Hamiltonoperator bestimmt, der kleinere nicht teilchenzahlerhaltende Beiträge besitzt als der Ausgangshamiltonoperator (zur Definition der **srod** vgl. Abschnitt 2.6).

Die entsprechenden Größen $\mathbf{srod}_{\text{eff,max}}$, $\mathbf{srod}_{0,\text{min}}$ und l_{eff} sind in den Abbildungen 4.6(a), 4.6(b) und 4.6(c) angegeben. Das Problem der richtigen Wahl des Wertes l_{eff} macht die Verwendung üblicher Optimierungsroutinen äußerst schwierig, zumal selbst in der untersten Abbildung 4.6(c) noch nicht einmal ein lokales Maximum bezüglich θ und λ vorliegt. Daher wurde die Suche nach lokalen Maxima in der θ - λ -Ebene stets graphisch durchgeführt.

Als zweites Beispiel soll der Fall $U = 0,286$ betrachtet werden. Analog zum Fall $U = 1$ bewegt man sich in Richtung immer kleinerer Winkel θ . In Abbildung 4.7 ist der Vakuumerwartungswert in Abhängigkeit von λ und θ bereits für ein Intervall dargestellt, in dem der Winkel θ die Größenordnung 10^{-7} besitzt. Im Gegensatz zum Fall $U = 1$ treten selbst in diesem Bereich keine Probleme mit der Konvergenz der kontinuierlichen unitären Transformation auf, so dass ohne weiteres bis zu einem Wert $l = 100$ gerechnet werden konnte.

In Tabelle 4.5 sind der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$, die Anregungsenergie $h_{1,1}$, sowie, die im Zweiteilchenraum hinzukommenden Energieverschiebungen für die Parameter $U = 1$, $\theta = 1,1 \cdot 10^{-6}$ und $\lambda = -13$ sowie für die Parameter $U = 0,286$, $\theta = 2,22 \cdot 10^{-7}$ und $\lambda = 0,0015$ dargestellt. Diese Parameterwahl maximiert in etwa den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ in Abbildung 4.6(c) bzw. in Abbildung 4.7.

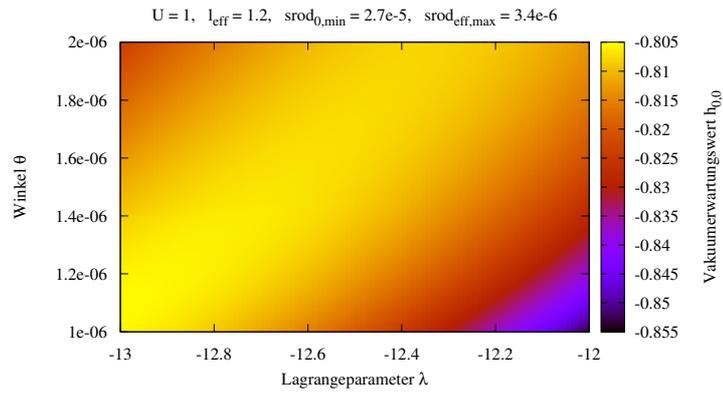
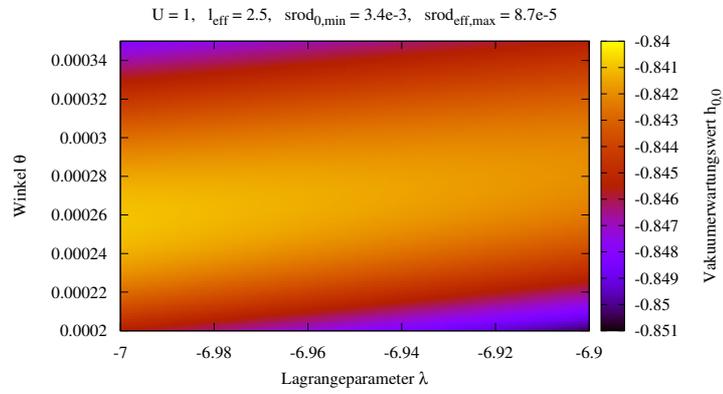
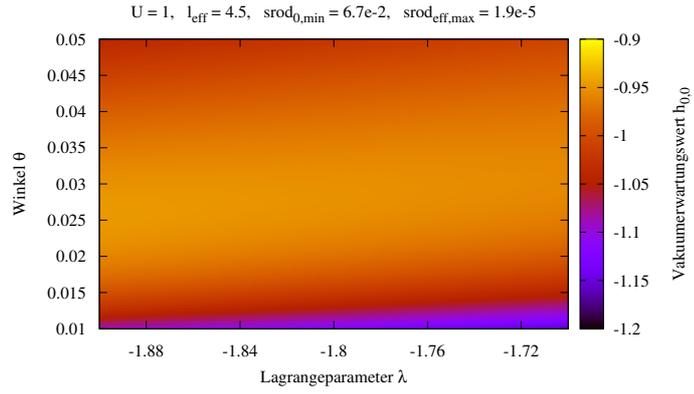


Abbildung 4.6: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 1$. Die Abbildungen zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Parameter λ und θ bei $U = 1$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Der Wert l_{eff} , bis zu dem die kontinuierliche unitäre Transformation durchgeführt wurde, ist in jeder Abbildung separat aufgeführt.

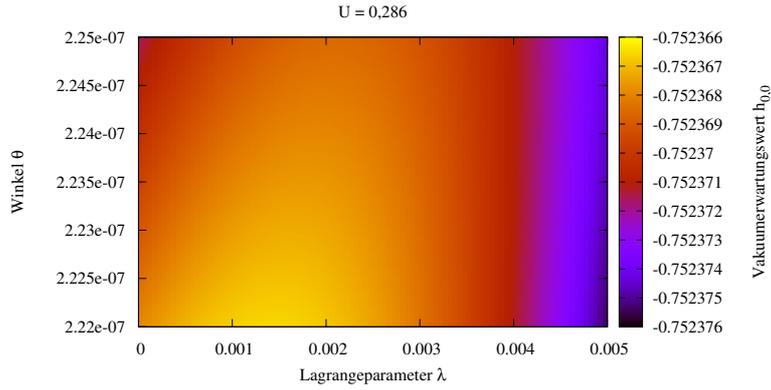


Abbildung 4.7: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 0,286$. Die Abbildungen zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Parameter λ und θ bei $U = 0,286$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt.

Interessanterweise beschreiben diese beiden Lösungen die physikalischen Zustände des Heisenberg-Dimers trotz der sehr kleinen Wahl des Winkels θ relativ gut. So sind die vier niedrigsten Eigenwerte¹ für den Fall $U = 1$ gegeben durch den Vakuumerwartungswert $h_{0,0} = -0,806$ und den dreifach entartetem Eigenwert $E_{2,2}^{ii} = 0,197$ (vgl. (4.3.15b)). Alle weiteren Eigenzustände, selbst die Einteilchenzustände, besitzen einen größeren Energieeigenwert. Wählt man $U = 0,286$, so erhält man einen Vakuumerwartungswert $h_{0,0} = -0,752$, und der dreifach entartete Erwartungswert nimmt den Wert $E_{2,2}^{ii} = 0,248$ an. In beiden Fällen weicht man somit nur noch um einen absoluten Fehler von 0,002 von den exakten Energieeigenwerten des Heisenberg-Dimers ab. Die unphysikalischen Einteilchenzustände besitzen jedoch bedauerlicherweise noch einen Eigenwert der unterhalb von $E_{2,2}$ liegt.

4.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurde zunächst eine Molekularfeld-Rechnung für das Heisenberg-Dimer in bosonischer Darstellung durchgeführt und anschließend versucht, diese mittels einer kontinuierlichen unitären Transformation zu verbessern. Da das Heisenberg-Dimer exakt gelöst werden kann, konnten die genäherten Ergebnisse leicht mit den exakten Lösungen verglichen werden.

Bei der Ersetzung der Spinoperatoren des Heisenberg-Dimers durch bosonische Operatoren wird der Hilbertraum formal von vier Dimensionen auf abzählbar unendlich viele erweitert. Der physikalisch relevante Unterraum wird dabei durch eine Nebenbedingung, die durch eine Operatorgleichung gegeben ist, definiert. In den durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen wird diese Nebenbedingung nur im Mittel erfüllt, was dazu führt, dass man in der Lage ist, im Rahmen der Molekularfeld-Näherung jeden beliebigen Grundzustandserwartungswert zu erzeugen. Die Ergebnisse der Molekularfeld-Rechnung verlieren dadurch natürlich ihre Aussagekraft. Der Winkel θ der Bogoliubov-Transformation, welche zum Diagonalisieren des Molekularfeld-Hamiltonoperators notwendig ist, wird allerdings alleine durch die Nebenbedingung festgelegt, so dass dieser bei allen durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen identisch gewählt werden muss.

Bei der anschließenden Behandlung des Heisenberg-Dimers mittels kontinuierlicher unitärer Trans-

¹Es wurden nur Zustände, die aus zwei oder weniger Teilchen bestehen, betrachtet.

foramtionen wurden die zuvor bei der Molekularfeld-Näherung vernachlässigten Terme zunächst vollständig berücksichtigt. Die Näherung geschah dabei erst beim Aufstellen der Flussgleichungen, da sämtliche Terme, welche, nachdem sie normalgeordnet wurden, aus sechs oder mehr bosonischen Operatoren bestanden, vernachlässigt wurden. Es wurden also Prozesse nicht berücksichtigt, an denen drei oder mehr Teilchen beteiligt sind. Ist man an den tiefliegenden Zuständen interessiert, so sollten solche Prozesse jedoch nur einen kleinen Beitrag liefern.

Auch bei der Behandlung des bosonischen Heisenberg-Dimers mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen ist das entscheidende Problem die Behandlung der Nebenbedingung für die physikalischen Zustände. Es zeigte sich, dass das übliche Einführen eines Lagrangeparameters λ zum Erfüllen der Nebenbedingung alleine nicht reicht. Dies liegt vermutlich daran, dass dadurch nicht gesichert wird, dass der physikalische Grundzustand der energetisch tiefstliegende ist. Da der verwendete Knetter-Uhrig-Generator üblicherweise den Hilbertraum so ordnet, dass der energetisch niedrigste Eigenzustand durch den Vakuumzustand repräsentiert wird, wird in diesem Fall ein unphysikalischer Zustand zum Vakuumzustand gemacht. Ziel war jedoch gerade eine Näherung zu finden, für die der Vakuumzustand als physikalischer Grundzustand interpretiert werden kann.

Erst durch das Addieren des Terms H_U , der die Nebenbedingung quadratisch enthält und somit die unphysikalischen Zustände energetisch erhöht, konnten die Startparameter so gewählt werden, dass der Vakuumenergieerwartungswert stationär bezüglich des Lagrangeparameters λ wird und demnach zumindest im Mittel die Nebenbedingung erfüllt. Für einen hinreichend großen Wert U ergeben sich jedoch deutliche quantitative Abweichungen von den exakten Werten.

Die besten Ergebnisse wurden interessanterweise für extrem kleine Winkel θ erzielt, wobei jedoch kein stationärer Punkt bezüglich λ und θ erreicht wurde. Ebenfalls ergaben sich dabei für den Wert $U = 1$ Probleme mit der Konvergenz der Flussgleichungen.

In dem Kapitel wurden die Ergebnisse der kontinuierlichen unitären Transformation nur für den Hamiltonoperator $H_{b,\lambda,U}$ vorgestellt. Es wurden jedoch auch analoge Rechnungen für den Hamiltonoperator $H_{a,\lambda,U} = H_{0,a} + H_\lambda + H_U$ durchgeführt, welche jedoch keine qualitativen Unterschiede zeigten.

Mehr Terme und somit höhere Anregungen bei dem Aufstellen der Flussgleichung zu berücksichtigen, wäre zwar bei diesem überschaubarem Problem des Heisenberg-Dimers noch möglich, allerdings für größere Systeme nicht mehr durchführbar, so dass es auch hier nicht genauer untersucht wurde.

Insgesamt scheint der betrachtete Zugang zur Beschreibung des Heisenberg-Dimers demnach nicht sinnvoll zu sein.

Eine im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersuchte Frage ist, ob vielleicht die Behandlung einer bosonischen Darstellung, deren Energiespektrum auch ohne den Term H_U nach unten beschränkt ist, bessere Ergebnisse liefert. Dies könnte insofern möglich sein, da ein nach unten beschränktes Spektrum benötigt wird, um zu beweisen, dass die Flussgleichung bei Verwendung des Knetter-Uhrig-Generators konvergiert (vgl. Abschnitt 2.4). Arovás und Auerbach [AA88] wählten absichtlich zur Durchführung einer Sattelpunktsnäherung eine Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Modells, so dass dessen Hamiltonoperator durch eine Summe von negativen quadratischen Formen $-A_{ij}^\dagger A_{ij}$ gegeben ist (vgl. dazu Gleichung (4.1.6)).

Aufgrund der Nebenbedingung können jedoch ebenfalls Darstellungen des antiferromagnetischen Heisenberg-Modells gewählt werden, die durch eine Summe von positiven quadratischen Formen gegeben sind. Als Hamiltonoperator des antiferromagnetischen Spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Dimers könnte zum Beispiel $H = \frac{J}{2} \left(F_{12}^\dagger F_{12} - \frac{3}{2} \right)$ mit $J > 0$ und $F_{12} = a_1^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_2$ betrachtet werden.¹

¹Eine derartige Darstellung verwendeten Arovás und Auerbach zur Behandlung des ferromagnetischen ($J < 0$) Heisenberg-Modells [AA88].

5 Untersuchung der fermionischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers

Nachdem im vorherigen Kapitel eine bosonische Darstellung des Heisenberg-Dimers untersucht wurde, werden in diesem Kapitel die Spinoperatoren des Heisenberg-Dimers gemäß Abschnitt 3.5 durch jeweils zwei fermionische Operatoren ersetzt. Die Dimension des Hilbertraums wird dadurch quadriert. Wie im bosonischen Fall existiert eine Nebenbedingung (3.5.2), welche die physikalisch relevanten Zustände definiert. Erneut werden alle Zustände, die diese Nebenbedingung nicht erfüllen als unphysikalisch bezeichnet.

Nach dem Darstellungswechsel liegen aufgrund der Struktur der Nebenbedingung (3.5.2) alle physikalischen Zustände in dem Unterraum, welcher aus $2NS$ -Teilchen besteht. Wie schon zuvor bezeichnet dabei N die Anzahl der betrachteten Gitterplätze und S den Spin, wobei nur der Fall $S = \frac{1}{2}$ betrachtet wird.

In völlig analoger Weise zum vorherigen Kapitel wird zunächst in Abschnitt 5.2 eine Molekularfeld-Rechnung für das Heisenberg-Dimer durchgeführt und anschließend in Abschnitt 5.3 versucht, die so gewonnenen Resultate durch eine kontinuierliche unitäre Transformation zu verbessern.

Erneut ist das Ziel, einen effektiven Hamiltonoperator zu bestimmen, so dass dessen Vakuumzustand $|G\rangle$ den Grundzustand beschreibt und die restlichen physikalischen Zustände als gebundene Zustände im Zweiteilchen-Unterraum liegen. Aufgrund der Erhaltung der z -Komponente des Gesamtspins (5.1.3) bei den in Abschnitt 5.2 und 5.3 durchgeführten Transformationen können die im Einteilchen-Unterraum liegenden Zustände keine physikalisch relevanten Zustände beschreiben.

Da bei der Darstellung der Spinoperatoren durch Fermionen der Hilbertraum endlich bleibt, ist es im Gegensatz zur bosonischen Darstellung möglich, die kontinuierliche unitäre Transformation exakt durchzuführen und mit trunkierten Rechnungen zu vergleichen.

5.1 Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers in fermionischer Darstellung

Ersetzt man gemäß (3.5.1) die Spinoperatoren durch fermionische Operatoren, so nimmt der Hamiltonoperator (3.2.1) des antiferromagnetischen ($J > 0$) Heisenberg-Dimers die Form

$$H_0 = \frac{J}{2} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) + \frac{J}{4} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} - c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \right) \quad (5.1.1)$$

an. Die Erhaltungsgrößen $\mathbf{S}_{\text{ges}}^2$ und S_{ges}^z (3.2.2) sind in der fermionischen Darstellung gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{ges}}^2 &= \frac{3}{4} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \\ &\quad - \frac{3}{2} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \right) \\ &\quad + \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

und

$$S_{\text{ges}}^z = \frac{1}{2} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} - c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} - c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \quad (5.1.3)$$

Der Gesamtspin in z -Richtung S_{ges}^z ist also für einen gegebenen Zustand einfach die Summe aller "Teilchen" minus die Anzahl aller "Löcher". Die vier physikalischen Eigenzustände des Hamiltonoperators (5.1.1), welche die Nebenbedingungen (3.5.2) erfüllen, sind gegeben durch

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (5.1.4a)$$

$$|t_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (5.1.4b)$$

$$|t_2\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle \quad (5.1.4c)$$

$$|t_3\rangle = c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (5.1.4d)$$

Der Zustand $|0\rangle$ ist dabei das Vakuum bezüglich der Operatoren $c_{i,\sigma}$. Das Singulett $|s\rangle$ besitzt den Energieeigenwert $-\frac{3}{4}J$ und die Triplettzustände $|t_i\rangle$ jeweils den Energieeigenwert $\frac{1}{4}J$. Wie bei der bosonischen Darstellung des Heisenberg-Dimers (4.1.1) mittels Schwinger-Bosonen (3.4.1) ist der Hilbertraum in der fermionischen Darstellung größer als in der Spindarstellung, solange man die Nebenbedingung (3.5.2) nicht berücksichtigt. Im Gegensatz zum bosonischen Fall bleibt die Dimension des Hilbertraumes jedoch bei der Darstellung durch Fermionen endlich. Während die Dimension in der Spindarstellung gleich $2^2 = 4$ ist, beträgt sie in der fermionischen Darstellung $2^4 = 16$. Somit bleiben neben den vier physikalischen Zuständen (5.1.4a) noch zwölf unphysikalische Zustände, welche die Nebenbedingung (3.5.2) nicht erfüllen.

Ein weiterer Vorteil der Darstellung des Heisenberg-Dimers durch Fermionen im Vergleich mit der Darstellung durch Bosonen ist, dass der fermionische Hamiltonoperator (5.1.1) invariant unter einer Teilchen-Loch-Transformation ist. Dabei überführt die Teilchen-Loch-Transformation jeden Erzeuger in den entsprechenden Vernichter und umgekehrt.

$$c_{j,\sigma}^\dagger \rightarrow c_{j,\sigma}, \quad c_{j,\sigma} \rightarrow c_{j,\sigma}^\dagger \quad (5.1.5)$$

Die unitäre Transformation $\hat{U}_{j\sigma}$ am Platz j der Teilchen-Loch Symmetrie kann geschrieben werden als¹

$$\begin{aligned} \hat{U}_{j\sigma} &= \exp \left(i \frac{\pi}{2} \left(c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger - 1 \right) \right) \\ &= (-i) \left(\cos \frac{\pi}{2} + i \sin \frac{\pi}{2} \left(c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger \right) \right) \\ &= \left(c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger \right) \quad . \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

Setzt man nun voraus, dass diese Symmetrie nicht gebrochen wird, dass also der Grundzustand ebenfalls diese Symmetrie besitzt, so gilt für den Grundzustandserwartungswert von $c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$

$$\begin{aligned} \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle &= \langle \hat{U}_{j\sigma}^\dagger \hat{U}_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{U}_{j\sigma}^\dagger \hat{U}_{j\sigma} \rangle \\ &= \langle \hat{U}_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{U}_{j\sigma}^\dagger \rangle \\ &= \langle c_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle \\ &= 1 - \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \quad . \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Somit folgt aus der Teilchen-Loch Symmetrie, dass der Erwartungswert von $c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ des Grundzustands die Nebenbedingung (3.5.2) erfüllt.

$$\langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle + \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle - 1 = 0 \quad (5.1.8)$$

Solange die Teilchen-Loch-Symmetrie nicht gebrochen wird, kann daher bei dieser fermionischen Darstellung auf das Einführen eines Lagrangeparameters λ verzichtet werden. Der Lagrangeparameter λ war im bosonischen Fall gerade notwendig, um die Nebenbedingung zumindest für den Erwartungswert des Grundzustandes zu erfüllen (vgl. Abschnitt 4.2.1).

¹Die -1 im Exponenten stellt lediglich eine Phase dar und könnte auch weggelassen werden.

5.1.1 Addition zusätzlicher Terme zum Hamiltonoperator

Analog zum bosonischen Fall (vgl. Gleichung (4.2.1) und (4.2.20)) werden die Terme

$$H_\lambda = \lambda \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) - 2\lambda \quad (5.1.9)$$

und

$$H_U = U \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} - 1 \right)^2 + U \left(c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} - 1 \right)^2 \quad (5.1.10)$$

definiert. Der Hamiltonoperator, der beide Terme H_λ und H_U enthält, wird mit

$$H_{\lambda,U} = H_0 + H_\lambda + H_U \quad (5.1.11)$$

bezeichnet. Wie schon zuvor erwähnt, sollte der Term H_λ aufgrund der Teilchen-Loch Symmetrie keinerlei Rolle spielen. Im Abschnitt 5.3 soll dennoch, die Abhängigkeit der Ergebnisse von dem Lagrangeparameter λ untersucht werden, da dieser als zusätzlicher Test verwendet werden kann, ob die Nebenbedingung im Mittel erfüllt ist.

Der Term H_U , welcher die Nebenbedingung (3.5.2) quadratisch enthält, wird - wie schon im bosonischen Fall - benötigt, um unphysikalische Zustände energetisch hochzuheben, so dass die physikalisch relevanten Zustände im unteren Bereich des Energiespektrums liegen.

5.2 Molekularfeld-Rechnung für das fermionische Heisenberg-Dimer

In diesem Abschnitt wird eine Molekularfeld-Näherung für den Hamiltonoperator (5.1.1) des fermionischen Heisenberg-Dimers durchgeführt [Weg]. Zusätzlich zu dieser Näherung werden alle Erwartungswerte von Operatoren, welche die z -Komponente des Gesamtspins (5.1.3) nicht erhalten, gleich null gesetzt. Dadurch erhält man den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H_{0,\text{MF}} = & -\frac{J}{2} \left(\langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger + \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \right) \\ & + \frac{J}{4} \left(\langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger + \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \right) \\ & + \frac{J}{4} \left(\left[\langle c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \rangle - \langle c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \rangle \right] c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + \left[\langle c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \rangle - \langle c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \rangle \right] c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} \right) \\ & + \frac{J}{4} \left(\left[\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} \rangle - \langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} \rangle \right] c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + \left[\langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} \rangle - \langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} \rangle \right] c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \right) \\ & + \frac{J}{2} \left(\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle + \langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle \right) \\ & - \frac{J}{4} \left(\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle + \langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle \right) \\ & - \frac{J}{4} \left(\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} \rangle \langle c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \rangle + \langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} \rangle \langle c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \rangle - \langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} \rangle \langle c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} \rangle - \langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} \rangle \langle c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} \rangle \right) . \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

Da die Nebenbedingung (3.5.2) bei der Molekularfeld-Näherung im Mittel erfüllt sein soll, müssen Erwartungswerte des Typs $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$ den Wert $\frac{1}{2}$ annehmen. Zudem werden die folgenden Schreibweisen

$$\chi_0 = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \quad (5.2.2a)$$

$$\chi_1 = \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle \Rightarrow \overline{\chi_1} = -\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \rangle \quad (5.2.2b)$$

$$\chi_2 = \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle \Rightarrow \overline{\chi_2} = -\langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \rangle \quad (5.2.2c)$$

verwendet. Der Molekularfeld-Hamiltonoperator (5.2.1) erhält dadurch die Form

$$H_{0,\text{MF}} = -\frac{J}{2} \left(\left[\chi_2 - \frac{1}{2}\chi_1 \right] c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + \left[\chi_1 - \frac{1}{2}\chi_2 \right] c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) - \frac{J}{2} \left(\left[\overline{\chi}_2 - \frac{1}{2}\overline{\chi}_1 \right] \chi_1 + \left[\overline{\chi}_1 - \frac{1}{2}\overline{\chi}_2 \right] \chi_2 \right) . \quad (5.2.3)$$

Mit den Definitionen

$$\Gamma_1 = -\frac{J}{2} \left[\chi_2 - \frac{1}{2}\chi_1 \right] \quad (5.2.4a)$$

$$\Gamma_2 = -\frac{J}{2} \left[\chi_1 - \frac{1}{2}\chi_2 \right] \quad (5.2.4b)$$

$$\chi_1 = -\frac{4}{3J} (\Gamma_1 + 2\Gamma_2) \quad (5.2.4c)$$

$$\chi_2 = -\frac{4}{3J} (\Gamma_2 + 2\Gamma_1) \quad (5.2.4d)$$

$$\Omega = -\frac{J}{2} \left(\left[\overline{\chi}_2 - \frac{1}{2}\overline{\chi}_1 \right] \chi_1 + \left[\overline{\chi}_1 - \frac{1}{2}\overline{\chi}_2 \right] \chi_2 \right) \quad (5.2.4e)$$

gelangt man letztendlich zu dem Hamiltonoperator

$$H_{0,\text{MF}} = \Gamma_1 c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - \overline{\Gamma}_1 c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} + \Gamma_2 c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger - \overline{\Gamma}_2 c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} + \Omega . \quad (5.2.5)$$

Dieser Hamiltonoperator kann durch die in Anhang A beschriebene Bogoliubov-Transformation für Fermionen diagonalisiert werden.

$$H_{0,\text{MF}} = \Gamma_1 e^{-i\varphi_1} \sin 2\theta_1 \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) + \Gamma_2 e^{-i\varphi_2} \sin 2\theta_2 \left(\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \right) - \Gamma_1 e^{-i\varphi_1} \sin 2\theta_1 - \Gamma_2 e^{-i\varphi_2} \sin 2\theta_2 + \Omega \quad (5.2.6)$$

Die neuen fermionischen Operatoren γ sind dabei gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow} \\ \gamma_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & e^{i\varphi_1} \sin \theta_1 \\ -e^{-i\varphi_1} \sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\uparrow} \\ c_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (5.2.7a)$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1\downarrow} \\ \gamma_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_2 & e^{i\varphi_2} \sin \theta_2 \\ -e^{-i\varphi_2} \sin \theta_2 & \cos \theta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\downarrow} \\ c_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} . \quad (5.2.7b)$$

Damit der Hamiltonoperator (5.2.6) die gewünschte diagonale Gestalt besitzt, muss für die Winkel θ_1 und θ_2 gemäß Abschnitt A.2.2

$$\cos 2\theta_i = 0 \quad \text{für } i = 1, 2 \quad (5.2.8)$$

gelten. Beschränkt man die Winkel auf das Intervall $[0, \pi)$ bleiben noch zwei mögliche Werte für die Winkel θ_1 und θ_2 über

$$\theta_i \in \left\{ \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4} \right\} \quad \text{für } i = 1, 2 . \quad (5.2.9)$$

Der Hamiltonoperator (5.2.6) besitzt als Molekularfeld-Grundzustand $|G\rangle$ das Vakuum bezüglich der fermionischen Operatoren $\gamma_{i,\sigma}$

$$\gamma_{i,\sigma} |G\rangle = 0, \quad \text{für } i = 1, 2 \quad \text{und } \sigma = \uparrow, \downarrow . \quad (5.2.10)$$

Die Erwartungswerte χ_0 , χ_1 und χ_2 können nun bezüglich dieses neuen Molekularfeld-Grundzustands $|G\rangle$ berechnet werden. Dazu stellt man die Operatoren $c_{1\uparrow}$, $c_{1\downarrow}$, $c_{2\uparrow}$ und $c_{2\downarrow}$ durch die neuen Operatoren $\gamma_{1\uparrow}$, $\gamma_{1\downarrow}$, $\gamma_{2\uparrow}$ und $\gamma_{2\downarrow}$ dar. Da im Folgenden nur Erwartungswerte bezüglich des neuen Vakuums $|G\rangle$ berechnet werden, wird anstelle von $\langle G| \cdot |G\rangle$ als abkürzende Schreibweise nur $\langle \cdot \rangle$ verwendet. Für die Erwartungswerte χ_0 , χ_1 und χ_2 erhält man

$$\chi_0 = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \sin^2 \theta_{1/2} = \frac{1}{2} \quad (5.2.11a)$$

$$\chi_1 = \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} e^{i\varphi_1} \sin 2\theta_1 \quad (5.2.11b)$$

$$\langle c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \rangle = -\frac{1}{2} e^{-i\varphi_1} \sin 2\theta_1 \quad (5.2.11c)$$

$$\chi_2 = \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} e^{i\varphi_2} \sin 2\theta_2 \quad (5.2.11d)$$

$$\langle c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \rangle = -\frac{1}{2} e^{-i\varphi_2} \sin 2\theta_2 \quad (5.2.11e)$$

Der Erwartungswert von χ_0 ist wie gefordert für beide möglichen Werte (5.2.9) der Winkel θ_1 und θ_2 gleich $\frac{1}{2}$. Sämtliche Erwartungswerte bezüglich $|G\rangle$, die bei der Molekularfeld-Näherung zunächst zusätzlich null gesetzt wurden, ergeben null, so dass eine selbstkonsistente Lösung vorliegt.

Durch Einsetzen der Erwartungswerte χ_1 und χ_2 folgt

$$\Gamma_1 e^{-i\varphi_1} \sin 2\theta_1 = -\frac{J}{4} \left(e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} \sin 2\theta_2 - \frac{1}{2} \sin 2\theta_1 \right) \sin 2\theta_1 \quad (5.2.12a)$$

$$\Gamma_2 e^{-i\varphi_2} \sin 2\theta_2 = -\frac{J}{4} \left(e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} \sin 2\theta_1 - \frac{1}{2} \sin 2\theta_2 \right) \sin 2\theta_2 \quad (5.2.12b)$$

Da jedoch diese beiden Größen nach (A.2.12) reell sein müssen¹, folgt für die Differenz $\varphi_1 - \varphi_2$, dass diese ein ganzzahliges Vielfaches von π sein muss. Ebenfalls sieht man, dass die Einschränkung für das Intervall der Winkel θ_1 und θ_2 auf $[0, \pi)$ keine wirkliche Einschränkung war, da alle auftretenden Größen bezüglich dieser Variablen π -periodisch sind. Zusätzlich sollten die Größen Γ_1 und Γ_2 positiv sein, möchte man sie als Anregungsenergien aus dem Grundzustand interpretieren. In Abhängigkeit der Wahl von $\varphi_1 - \varphi_2$ sollen nun mögliche Lösungen untersucht werden.

- i) Zunächst soll der Fall betrachtet werden, dass $\varphi_1 - \varphi_2 = 0 \pmod{2\pi}$ gilt. In diesem Fall sind die Exponentialfunktionen in (5.2.12) gleich eins und man kann nur noch die Werte der beiden Winkel θ_1 und θ_2 wählen. Wählt man $\theta_1 = \theta_2$, so sind beide Größen Γ_1 und Γ_2 negativ, wodurch sie nicht als Anregungsenergien aus dem Grundzustand interpretierbar sind. Wählt man hingegen $\theta_1 \neq \theta_2$, so sind beide Größen positiv und nehmen den Wert $\frac{3}{8}J$ an.
- ii) Betrachtet man den Fall $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi \pmod{2\pi}$, so sieht man, dass $\theta_1 = \theta_2$ sein muss, damit die beide Größen Γ_1 und Γ_2 positiv sind. Erneut besitzen sie dann den Wert $\frac{3}{8}J$.

Beide physikalisch sinnvollen Lösungen liefern somit dieselbe Anregungsenergie

$$\boxed{\omega = \frac{3}{8}J} \quad (5.2.13)$$

Die Molekularfeld-Grundzustandsenergie E_0 ist gemäß (5.2.6) in beiden Fällen gegeben durch

$$\boxed{E_0 = \langle H_0 \rangle = \langle H_{0,\text{MF}} \rangle = -\frac{3}{8}J} \quad (5.2.14)$$

Somit ist die durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmte Grundzustandsenergie E_0 halb so groß wie die Grundzustandsenergie des Heisenberg-Dimers.

¹Der Hamiltonoperator wäre ansonsten ebenfalls nicht hermitesch.

Würde man bei der Molekularfeld-Rechnung ebenfalls den Term H_λ (5.1.9) berücksichtigen, so würde aus der Bedingung (5.2.11a), welche den Betrag des Winkels θ festlegt, zusammen mit den Bedingungen (5.2.8) folgen, dass der Lagrangeparameter $\lambda = 0$ gewählt werden muss.

Die Berücksichtigung des Terms H_U (5.1.10) mit $U > 0$ würde lediglich die Grundzustandsenergie um U erhöhen und somit das Ergebnis für die Molekularfeld-Grundzustandsenergie verschlechtern. Für die Wahl des Winkels θ besitzt der Term H_U im Rahmen der durchgeführten Molekularfeld-Rechnung keinerlei Bedeutung.

Die durch die Molekularfeld-Rechnung erzielten Ergebnisse sollen nun im folgenden Abschnitt mittels einer kontinuierlichen unitären Transformation verbessert werden.

5.3 Verbesserung der Molekularfeld-Rechnung mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen

Die im vorherigen Abschnitt bei der Molekularfeld-Rechnung vernachlässigten quartischen Terme sollen nun mittels der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen ebenfalls berücksichtigt werden, so dass neben der Verbesserung des durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmten Näherungswerts E_0 für die Grundzustandsenergie zusätzlich der physikalisch ebenfalls relevante Zweiteilchen-Sektor beschrieben werden kann. Dazu werden alle Operatoren des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}$ (5.1.11) gemäß

$$\begin{pmatrix} c_{1\uparrow} \\ c_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow} \\ \gamma_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (5.3.1a)$$

$$\begin{pmatrix} c_{1\downarrow} \\ c_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{1\downarrow} \\ \gamma_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (5.3.1b)$$

transformiert und normalgeordnet. Die in der Transformation (5.2.7) auftretenden Winkel φ_1 und φ_2 wurden beide gleich null gewählt, damit alle Koeffizienten des Hamiltonoperators reell bleiben. Demnach müssen die Winkel θ_1 und θ_2 so gewählt werden, dass $\theta_1 = -\theta_2$ gilt. Die Normalordnung wird wie im Falle der Bosonen so durchgeführt, dass alle teilchenerzeugenden Operatoren einer Sorte Fermionen links von den entsprechenden teilchenvernichtenden Operatoren stehen. Im Gegensatz zum bosonischen Fall ist nun aufgrund der Antikommutatorrelationen (2.5.5) der Fermionen auch die Anordnung von unterschiedlichen Arten von Fermionen für das Vorzeichen eines Koeffizienten relevant. Durch die Transformation (5.3.1) und die anschließende Normalordnung erhält der Hamiltonoperator

$H_{\lambda,U}$ die Form

$$\begin{aligned}
 H_{\lambda,U} = & h_{0,0} \\
 & + h_{1,1} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) \\
 & + h_{0,2} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{2,2}^a \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) \\
 & + h_{2,2}^b \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) \\
 & + h_{2,2}^c \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \right) \\
 & + h_{2,2}^d \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \right) \\
 & + h_{1,3} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{0,4} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{3,3} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right. \\
 & \quad \left. + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) \\
 & + h_{2,4} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) .
 \end{aligned} \tag{5.3.2}$$

Wie schon im vorherigen Kapitel steht ein Koeffizient, der mit $h_{i,j}$ bezeichnet wird, entweder vor einem oder mehreren Termen von Operatoren, die entweder aus i Erzeugern und j Vernichtern oder aus j Erzeugern und i Vernichtern bestehen. Explizit sind die Koeffizienten $h_{i,j}$, welche später die Startwerte der kontinuierlichen unitären Transformation definieren, durch

$$h_{0,0}(0) = J \left(-\frac{3}{8} \sin^2 2\theta \right) + U \left(\frac{1}{2} (\cos 4\theta + 3) \right) + \lambda (4 \sin^2 \theta - 2) \tag{5.3.3a}$$

$$h_{1,1}(0) = J \left(\frac{3}{8} \sin^2 2\theta \right) + U (-\cos^2 2\theta) + \lambda (\cos 2\theta) \tag{5.3.3b}$$

$$h_{0,2}(0) = J \left(\frac{3}{16} \sin 4\theta \right) + U \left(\frac{1}{2} \sin 4\theta \right) + \lambda (-\sin 2\theta) \tag{5.3.3c}$$

$$h_{2,2}^a(0) = J \left(-\frac{3}{8} \sin^2 2\theta \right) + U \left(\frac{1}{2} (\cos 4\theta + 3) \right) \tag{5.3.3d}$$

$$h_{2,2}^b(0) = J \left(\frac{1}{16} (3 \cos 4\theta + 1) \right) + U (-\sin^2 2\theta) \tag{5.3.3e}$$

$$h_{2,2}^c(0) = J \left(-\frac{1}{4} \right) \tag{5.3.3f}$$

$$h_{2,2}^d(0) = J \left(-\frac{1}{16} (3 \cos 4\theta + 5) \right) + U (\sin^2 2\theta) \tag{5.3.3g}$$

$$h_{1,3}(0) = J \left(\frac{3}{16} \sin 4\theta \right) + U \left(\frac{1}{2} \sin 4\theta \right) \tag{5.3.3h}$$

$$h_{0,4}(0) = J \left(-\frac{3}{8} \sin^2 2\theta \right) + U (-\sin^2 2\theta) \tag{5.3.3i}$$

$$h_{3,3}(0) = 0 \tag{5.3.3j}$$

$$h_{2,4}(0) = 0 \tag{5.3.3k}$$

gegeben. Wählt man den Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$, den Lagrangeparameter $\lambda = 0$ und vernachlässigt zusätzlich sämtliche quadratischen Terme, so ergibt sich gerade der Molekularfeld-Hamiltonoperator des vorherigen Abschnittes 5.2. Die Terme mit den Koeffizienten $h_{3,3}$ und $h_{2,4}$ entstehen nicht durch die

Transformation (5.3.1), spielen aber im Folgenden beim Aufstellen der Flussgleichungen eine entscheidende Rolle und sind der Vollständigkeit halber in (5.3.3) schon mit aufgeführt. Mit Hilfe des Knetter-Uhrig-Generators soll nun durch eine kontinuierliche unitäre Transformation ein effektiver teilchenzahlerhaltender Hamiltonoperator bestimmt werden. Der Generator η kann direkt anhand der Form des Hamiltonoperators (5.3.2) abgelesen werden und ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \eta = & h_{0,2} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger - \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{1,3} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{0,4} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \text{h.c.} \right) \\
 & + h_{2,4} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \text{h.c.} \right) .
 \end{aligned} \tag{5.3.4}$$

Bildet man den Kommutator $[\eta, H]$ und ordnet anschließend die entstehenden Terme normal, so können mittels eines Koeffizientenvergleichs gemäß (2.1.5) die Flussgleichungen aufgestellt werden. Bei der Berechnung des Kommutators entstehen neue Terme, welche jeweils aus sechs Operatoren aufgebaut sind. Diese neuen Terme und deren zugehörige Koeffizienten wurden in Gleichung (5.3.2) und (5.3.3) schon mit aufgeführt. Zusätzlich müssen alle neuen nicht teilchenzahlerhaltenden Terme auch im Generator (5.3.4) berücksichtigt werden. Die so resultierenden Flussgleichungen sind gegeben durch

$$\partial_t h_{0,0} = -4h_{0,2}h_{0,2} - 2h_{0,4}h_{0,4} \tag{5.3.5a}$$

$$\partial_t h_{1,1} = 2h_{0,2}h_{0,2} + 2h_{0,4}h_{0,4} - 2h_{1,3}h_{1,3} + 4h_{0,2}h_{1,3} \tag{5.3.5b}$$

$$\partial_t h_{0,2} = -h_{0,2}h_{2,2}^d + 2h_{0,2}h_{0,4} - 2h_{0,2}h_{1,1} - h_{0,2}h_{2,2}^c - 4h_{0,4}h_{1,3} - 2h_{0,4}h_{2,4} \tag{5.3.5c}$$

$$\partial_t h_{2,2}^a = -2h_{0,4}h_{0,4} + 4h_{1,3}h_{1,3} - 8h_{0,2}h_{1,3} \tag{5.3.5d}$$

$$\partial_t h_{2,2}^b = -2h_{0,4}h_{0,4} + 4h_{1,3}h_{1,3} - 8h_{0,2}h_{1,3} \tag{5.3.5e}$$

$$\partial_t h_{2,2}^c = -2h_{0,4}h_{0,4} - 4h_{1,3}h_{1,3} - 2h_{2,4}h_{2,4} + 4h_{0,2}h_{2,4} - 8h_{1,3}h_{2,4} \tag{5.3.5f}$$

$$\partial_t h_{2,2}^d = 8h_{0,2}h_{1,3} - 8h_{1,3}h_{1,3} + 4h_{0,2}h_{2,4} - 8h_{1,3}h_{2,4} - 2h_{2,4}h_{2,4} \tag{5.3.5g}$$

$$\begin{aligned}
 \partial_t h_{1,3} = & -h_{0,2}h_{2,2}^d + 2h_{0,2}h_{0,4} + h_{0,2}h_{2,2}^b - 4h_{0,4}h_{1,3} - 2h_{1,1}h_{1,3} - h_{2,2}^c h_{1,3} - h_{2,2}^b h_{1,3} \\
 & - 2h_{0,4}h_{2,4} + h_{0,2}h_{2,2}^a - h_{1,3}h_{2,2}^a + h_{0,2}h_{3,3} - h_{1,3}h_{3,3}
 \end{aligned} \tag{5.3.5h}$$

$$\partial_t h_{0,4} = -4h_{0,4}h_{1,1} - 2h_{0,4}h_{2,2}^c - 2h_{0,4}h_{2,2}^b - 2h_{0,4}h_{2,2}^a - 4h_{0,4}h_{3,3} \tag{5.3.5i}$$

$$\partial_t h_{3,3} = 2h_{0,4}h_{0,4} + 4h_{1,3}h_{1,3} + 2h_{2,4}h_{2,4} - 4h_{0,2}h_{2,4} + 8h_{1,3}h_{2,4} \tag{5.3.5j}$$

$$\begin{aligned}
 \partial_t h_{2,4} = & 2h_{2,2}^d h_{1,3} + 4h_{0,4}h_{1,3} - 2h_{2,2}^b h_{1,3} + h_{2,2}^d h_{2,4} + 2h_{0,4}h_{2,4} - 2h_{1,1}h_{2,4} - h_{2,2}^c h_{2,4} \\
 & - 2h_{2,2}^b h_{2,4} - 2h_{1,3}h_{2,2}^a - 2h_{2,2}^a h_{2,4} + 2h_{0,2}h_{3,3} - 6h_{1,3}h_{3,3} - 4h_{2,4}h_{3,3} .
 \end{aligned} \tag{5.3.5k}$$

Diese Flussgleichungen beschreiben die exakte kontinuierliche unitäre Transformation, ohne dass irgendeine Näherung durchgeführt wurde. Das Aufstellen der kompletten exakten Flussgleichung war im vorherigen Kapitel 4 bei der bosonischen Darstellung nicht möglich. Da jedoch der Hilbertraum bei der fermionischen Darstellung im Gegensatz zum bosonischen Fall endliche Dimension besitzt, kann nun das Problem exakt behandelt werden. Dadurch hat man die Möglichkeit exakte Rechnungen mit trunkierten Rechnungen, in denen zum Beispiel die Koeffizienten $h_{3,3}$ und $h_{2,4}$ oder nur der Koeffizient $h_{2,4}$ nicht berücksichtigt werden, zu vergleichen.

Die Startwerte der Flussgleichungen (5.3.5) sind gegeben durch (5.3.3) und hängen von den drei Parametern θ , λ und U ab. Bei sämtlichen numerischen Rechnungen wurde der Parameter J gleich eins gesetzt. Erneut wurde zur numerischen Integration MATHEMATICA 4.1 verwendet und jeweils bis zu einem Wert von $l = 100$ gerechnet, so dass für jede Rechnung ein Wert ($\mathbf{srod} < 10^{-10}$) erzielt wurde. Nachdem die kontinuierliche unitäre Transformation durchgeführt wurde, können die nicht teilchenzahlerhaltenden Terme in sehr guter Näherung vernachlässigt werden. Dadurch erhält man für das Vakuum sowie für den Ein- und Zweiteilchenunterraum die in Tabelle 5.1 dargestellten Eigenzustände.

Tabelle 5.1: Eigenzustände des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}$ nach der unitären Transformation

| Eigenzustand | Eigenwert | S_{ges}^z | S_{ges} |
|--|--|--------------------|------------------|
| Vakuum | | | |
| $ G\rangle$ | $h_{0,0}$ | 0 | 0 |
| Einteilcheneigenzustände | | | |
| $\gamma_{1\uparrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| $\gamma_{1\downarrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $-\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| $\gamma_{2\uparrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| $\gamma_{2\downarrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + h_{1,1}$ | $-\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| Zweiteilcheneigenzustände | | | |
| $\frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger) G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^c - h_{2,2}^d$ | 0 | 0 |
| $\frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger) G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^c + h_{2,2}^d$ | 0 | 1 |
| $\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b$ | 1 | 1 |
| $\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^b$ | -1 | 1 |
| $\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^a$ | 0 | 1 |
| $\gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger G\rangle$ | $h_{0,0} + 2h_{1,1} + h_{2,2}^a$ | 0 | 1 |

Zusätzlich sind in Tabelle 5.1 die jeweiligen Eigenwerte, die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z und der Gesamtspin S_{ges} aufgeführt. Sowohl die z -Komponente des Gesamtspins S_{ges}^z (5.1.3) als auch das Quadrat des Gesamtspins $\mathbf{S}_{\text{ges}}^2$ (5.1.2) kommutieren mit dem Generator η (5.3.4). Dadurch sind diese Größen invariant unter der zuvor durchgeführten Bogoliubov-Transformation (5.3.1) und der kontinuierlichen unitären Transformation. Es können demnach die in Tabelle 5.1 angegebenen Werte für die z -Komponente des Gesamtspins wie auch der Gesamtspin mittels Gleichung (5.1.3) bzw. (5.1.2) berechnet werden. Dabei sind lediglich die Operatoren $c_{i\sigma}$ durch die entsprechenden Operatoren $\gamma_{i\sigma}$ zu ersetzen.

Genau wie im vorherigen Kapitel 4, in dem eine bosonische Darstellung des Heisenberg-Dimers betrachtet wurde, soll das Verhalten des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Startparameter θ , λ und U betrachtet werden. Trunkiert man die Flussgleichung, so soll der Parameter λ erneut so gewählt werden, dass

$$\partial_\lambda \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = \partial_\lambda h_{0,0} = 0 \quad (5.3.6)$$

gilt und somit für den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ die Nebenbedingung (3.5.2) zumindest im Mittel erfüllt ist. Für den Winkel θ soll ebenfalls

$$\partial_\theta \langle H_{b,\lambda,U} \rangle = \partial_\theta h_{0,0} = 0 \quad (5.3.7)$$

gelten, da der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ bei einer exakten Rechnung von der Wahl des Winkels θ unabhängig sein sollte, und man demnach für eine genäherte Rechnung den Winkel θ so wählen sollte, dass dieser möglichst stabil bezüglich Veränderungen ist [Ste81]. Der Parameter U wird in den folgenden Rechnungen dazu genutzt, die Energieeigenwerte unphysikalischer Zustände zu erhöhen.

5.3.1 Ergebnisse und Diskussion für den Molekularfeld-Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$

In diesem Abschnitt sollen zunächst die Fälle untersucht werden, in denen der Winkel θ den Wert $\frac{\pi}{4}$ besitzt, er also mit dem durch die Molekularfeld-Rechnung (5.2) bestimmten Wert übereinstimmt. Bevor numerische Ergebnisse dargestellt werden, wird für den Fall $\lambda = 0$ analytisch gezeigt, dass eine Vernachlässigung des Koeffizienten $h_{3,3}$ zur Divergenz der Flussgleichungen führt.

Wählt man den Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$, so ist der Koeffizient $h_{1,3}$ gemäß (5.3.3h) gleich null. Setzt man nun zusätzlich den Parameter λ gleich null, so verschwindet nach (5.3.3c) ebenfalls der Term $h_{0,2}$. Dadurch sind jedoch alle Startwerte von Termen, welche die Teilchenzahl um zwei erhöhen oder verringern, gleich null. Aufgrund der Struktur des gewählten Generators (2.4.5) bleiben sie dies auch während der gesamten kontinuierlichen unitären Transformation. Der Koeffizient $h_{2,4}$ wird ebenfalls nicht erzeugt. Somit ist der Koeffizient $h_{0,4}$ der einzige relevante, nicht diagonale Term und die gesamte Flussgleichung (5.3.5) vereinfacht sich zu

$$\partial_t h_{0,0} = -2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8a)$$

$$\partial_t h_{1,1} = 2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8b)$$

$$\partial_t h_{2,2}^a = -2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8c)$$

$$\partial_t h_{2,2}^b = -2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8d)$$

$$\partial_t h_{2,2}^c = -2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8e)$$

$$\partial_t h_{2,2}^d = 0 \quad (5.3.8f)$$

$$\partial_t h_{0,4} = -4h_{0,4}h_{1,1} - 2h_{0,4}h_{2,2}^c - 2h_{0,4}h_{2,2}^b - 2h_{0,4}h_{2,2}^a - 4h_{0,4}h_{3,3} \quad (5.3.8g)$$

$$\partial_t h_{3,3} = 2h_{0,4}h_{0,4} \quad (5.3.8h)$$

mit den Startwerten

$$h_{0,0}(0) = -\frac{3}{8}J + U \quad (5.3.9a)$$

$$h_{1,1}(0) = \frac{3}{8}J \quad (5.3.9b)$$

$$h_{2,2}^a(0) = -\frac{3}{8}J + U \quad (5.3.9c)$$

$$h_{2,2}^b(0) = -\frac{1}{8}J - U \quad (5.3.9d)$$

$$h_{2,2}^c(0) = -\frac{1}{4}J \quad (5.3.9e)$$

$$h_{2,2}^d(0) = -\frac{1}{8}J + U \quad (5.3.9f)$$

$$h_{0,4}(0) = -\frac{3}{8}J - U \quad (5.3.9g)$$

$$h_{3,3}(0) = 0 \quad (5.3.9h)$$

Anhand dieses Anfangswertproblems (5.3.8, 5.3.9) wird deutlich, dass das Vernachlässigen von Koeffizienten, die höhere Anregungen beschreiben, dazu führen kann, dass das gesamte Differentialgleichungssystem divergiert. Dazu betrachte man die Gleichung (5.3.8g), die wie folgt umgeschrieben werden kann

$$\partial_t h_{0,4} = -2h_{0,4}(g + 2h_{3,3}) \quad (5.3.10)$$

Die Funktion g ist dabei gegeben durch

$$g = 2h_{1,1} + h_{2,2}^a + h_{2,2}^b + h_{2,2}^c \quad (5.3.11)$$

Für alle Werte von U hat die Funktion g aufgrund von (5.3.8) und (5.3.9) die Eigenschaften

$$g(0) = 0 \quad \text{und} \quad \partial_t g = -2h_{0,4}h_{0,4} \leq 0 \quad (5.3.12)$$

Die Funktion g ist also entweder konstant null für den Fall, dass $h_{0,4}$ gleich null ist, oder für alle $l \in \mathbb{R}_+$ negativ. Wird der Koeffizient $h_{3,3}$ vernachlässigt, so erhält man die Gleichung

$$\partial_l h_{0,4} = -h_{0,4} \cdot g \quad . \quad (5.3.13)$$

Die rechte Seite der Gleichung (5.3.13) besitzt somit immer das gleiche Vorzeichen wie $h_{0,4}$. Demnach divergiert die Gleichung (5.3.13) und mit ihr das gesamte DGL-System (5.3.8), sobald $h_{0,4}$ ungleich null ist.

Berücksichtigt man den Term $h_{3,3}$, so ist die Rechnung exakt für den Fall, dass $\theta = \frac{\pi}{4}$ und $\lambda = 0$ ist. Wählt man $\lambda \neq 0$, so müssen wieder alle Terme $h_{0,2}$, $h_{1,3}$ und $h_{2,4}$, welche die Teilchenzahl um zwei erhöhen oder verringern, für eine exakte Rechnung berücksichtigt werden. Die Ergebnisse für den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ sind für den Fall der exakten Rechnung in Abbildung 5.1 dargestellt. Anhand dieser Abbildung sieht man sehr deutlich, dass wie in Abschnitt 2.5.2 beschrieben,

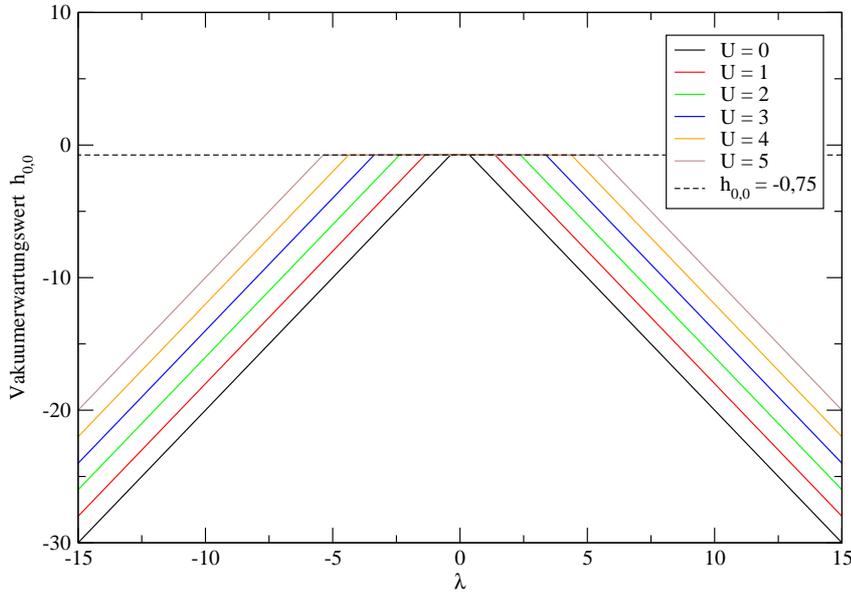


Abbildung 5.1: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \frac{\pi}{4}$ (exakt). Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters λ für unterschiedliche Werte von U und festen Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ ohne Trunkierung. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt. Zusätzlich ist die Gerade $h_{0,0} = -0,75$ eingezeichnet, die dem physikalischen Grundzustandserwartungswert des Heisenberg-Dimers entspricht.

der Generator die Zustände so ordnet, dass der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ mit dem Grundzustandserwartungswert bzw. dem kleinsten Eigenwert übereinstimmt. Sobald $|\lambda| > U - 0,325$ ist, besitzt der Hamiltonoperator (5.1.11) einen unphysikalischen Eigenwert, der kleiner ist als der physikalische Grundzustand. Der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ liefert dann nach der kontinuierlichen unitären Transformation gerade diesen unphysikalischen Eigenwert und nicht mehr den gewollten Eigenwert $-0,75$ des Grundzustandes des Heisenberg-Dimers.

Ein zu großer Wert λ führt demnach dazu, dass unphysikalische Zustände zum Vakuumzustand gemacht werden. Dies wurde schon im vorherigen Kapitel 4 vermutet und kann hier anhand von exakt

durchgeführten kontinuierlichen unitären Transformationen bestätigt werden.

Bevor irgendeine Transformation durchgeführt wurde, können unphysikalische Zustände, welche im obengenannten Fall einen Energieeigenwert unterhalb des physikalischen Grundzustandes besitzen, leicht angegeben werden

$$c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad \text{für } i = 1, 2 \quad \text{und } \lambda < 0 \quad (5.3.14a)$$

$$|0\rangle \quad \text{für } \lambda > 0 \quad . \quad (5.3.14b)$$

Der Zustand $|0\rangle$ bezeichnet dabei das Vakuum bezüglich der Operatoren $c_{i,\sigma}$. Die Eigenwerte der drei unphysikalischen Zustände (5.3.14) sind durch

$$H_{\lambda,U} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle = (2U + 2\lambda) c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad \text{für } i = 1, 2 \quad (5.3.15a)$$

und

$$H_{\lambda,U} |0\rangle = (2U - 2\lambda) |0\rangle \quad (5.3.15b)$$

gegeben.

Eine mögliche Trunkierung des Anfangswertproblems (5.3.8, 5.3.9) ist, den nichtdiagonalen Term $h_{2,4}$ zu vernachlässigen. In Abbildung 5.2 ist der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ in Abhängigkeit von λ im Falle dieser Trunkierung dargestellt.

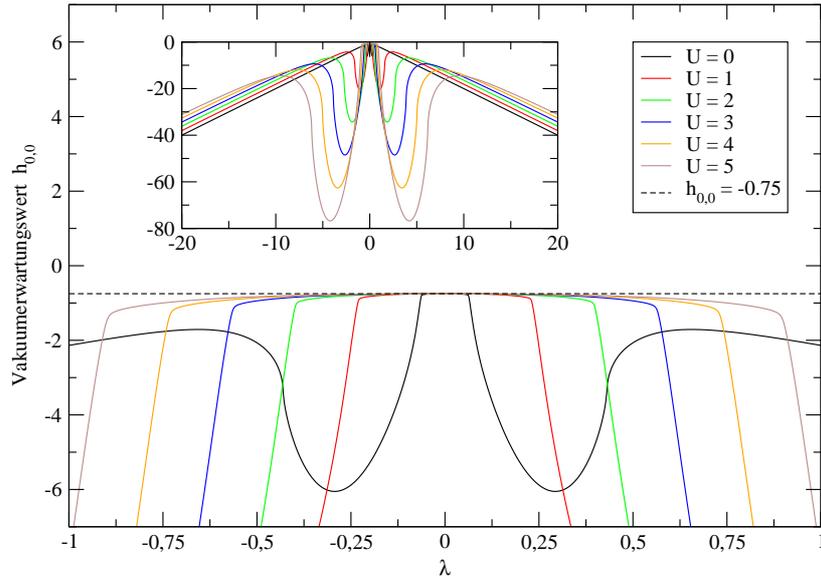


Abbildung 5.2: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter λ bei $\theta = \frac{\pi}{4}$ (trunkiert). Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters λ für unterschiedliche Werte von U und festen Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ mit Trunkierung ($h_{2,4} \equiv 0$). Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt. Zusätzlich ist die Gerade $h_{0,0} = -0,75$ eingezeichnet, die dem physikalischen Grundzustandserwartungswert des Heisenberg-Dimers entspricht.

Der Eigenwert des physikalischen Grundzustandes wird bei der trunkierten Rechnung nur noch bei dem stationären Punkt $\lambda = 0$ erzielt. Alle anderen dargestellten stationären Punkte weichen von dem physikalischen Grundzustandswert deutlich ab, wobei sich die Abweichungen mit steigendem U -Wert vergrößern. Die Wahl von $\lambda = 0$ entspricht jedoch bei einem Winkel von $\theta = \frac{\pi}{4}$ wie oben diskutiert einer exakten Rechnung, so dass das Erreichen des exakten Werts für den Grundzustandserwartungswert nicht überraschend ist.

5.3.2 Ergebnisse und Diskussion für beliebige Winkel θ

Zunächst sollen nun Abweichungen vom Molekularfeld-Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ für den Fall $\lambda = 0$ diskutiert werden. Als mögliche Trunkierung wurde wieder der Koeffizient $h_{2,4}$ vernachlässigt. In Abbildung 5.3 ist der Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ nach der unitären Transformation in Abhängigkeit des Winkels θ im trunkierten Fall für unterschiedliche U -Werte dargestellt. Die Ergebnisse der nicht trunkierten

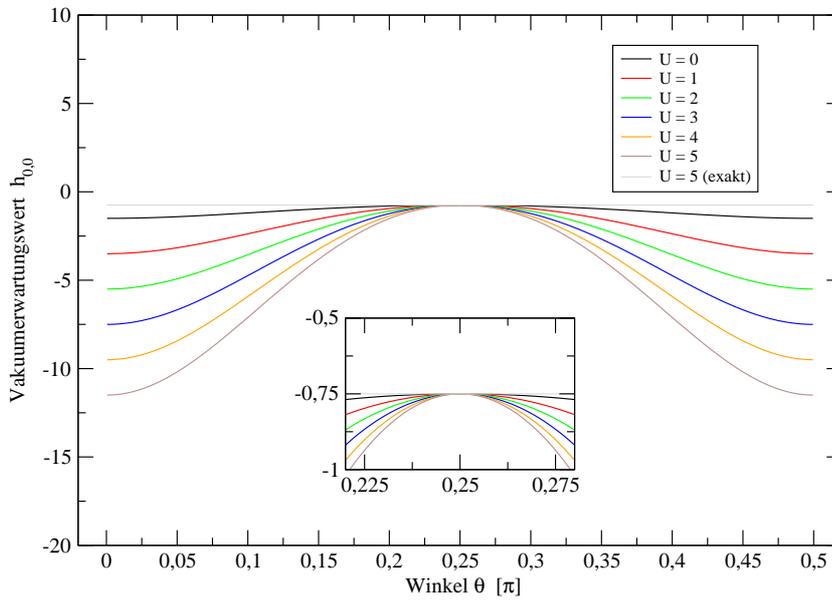


Abbildung 5.3: Abhängigkeit des Vakuum Erwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Winkel θ bei $\lambda = 0$. Die Abbildung zeigt den Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Winkels θ für unterschiedliche Werte von U und festes $\lambda = 0$ mit Trunkierung ($h_{2,4} \equiv 0$). Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt. Zusätzlich sind die Ergebnisse für $h_{0,0}$ ohne Trunkierung für $U = 5$ dargestellt (grauer Graph). Das DGL-System wurde bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt.

Rechnung sind für den Fall $U = 5$ ebenfalls eingezeichnet. Da für den Fall $\lambda = 0$ alle Startwerte (5.3.3) $\frac{\pi}{2}$ -periodisch sind, wird die gesamte Winkelabhängigkeit von $h_{0,0}$ in Abbildung 5.3 erfasst. Für alle betrachteten U -Werte wird $h_{0,0}$ genau bei dem durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmten Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ stationär und ist dort gleich dem exakten Grundzustandserwartungswert von $-0,75$. Wie jedoch auch schon vorher erwähnt tritt bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ der bei der Trunkierung vernachlässigte Koeffizient $h_{2,4}$ gar nicht auf, und die unitäre Transformation ist in diesem Fall exakt. Nachdem die Spezialfälle $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ behandelt wurden, soll nun untersucht werden, ob es

Tabelle 5.2: Ergebnisse zur Bestimmung des Energiespektrums

| # Zustände | | | 1 | 4 | 1 | 1 | 2 | 2 | | |
|------------|-----------------|-----------|-----------|-----------|-------------------------|-------------------------|-------------|--------------|-----------|-----------------------|
| U | θ | λ | $h_{0,0}$ | $h_{1,1}$ | $h_{2,2}^c - h_{2,2}^d$ | $h_{2,2}^c + h_{2,2}^d$ | $h_{2,2}^b$ | $2h_{2,2}^a$ | $h_{3,3}$ | srod |
| 2 | $\frac{\pi}{4}$ | 0 | -0,75 | 2,75 | -4,5 | -0,75 | -4,5 | -0,75 | 2,375 | $1,95 \cdot 10^{-26}$ |

noch weitere stationäre Punkte in der θ - λ -Ebene gibt. Die Ergebnisse der Rechnungen sind exemplarisch für den Fall $U = 2$ in Abbildung 5.3.2 dargestellt. Die Abbildungen 5.4(a) und 5.4(b) zeigen jeweils Ergebnisse für Rechnungen, bei denen keine Trunkierung vorgenommen wurde. Man sieht erneut deutlich, dass, sobald der Lagrangeparameter λ betragsmäßig zu groß wird, nicht mehr der physikalische Grundzustand erreicht wird. In diesen Fällen existiert mindestens ein unphysikalischer Zustand, der einen Energieeigenwert besitzt, der unterhalb des physikalischen Grundzustands liegt, und die kontinuierliche unitäre Transformation ordnet diesem unphysikalischen Eigenwert den Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ zu.

Bei den in Abbildung 5.4(c) und 5.4(d) dargestellten Ergebnissen wurden die Flussgleichungen trunziert, indem der Koeffizient $h_{2,4}$ vernachlässigt wurde. In dem schon betrachteten Punkt $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ (bzw. $\theta = \frac{3\pi}{4}$)¹ befindet sich ein stationärer Punkt bezüglich λ und θ . Dessen Umgebung ist in Abbildung 5.3.2 noch einmal genauer dargestellt. Neben diesem lokalen Maximum entstehen bei den trunzierten Rechnungen lokale Minima, welche allerdings einen viel zu kleinen Wert für den Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ liefern ($h_{0,0} \approx -50$).

Weitere stationäre Punkte des Vakuum Erwartungswerts $h_{0,0}$ bezüglich des Lagrangeparameters λ und des Winkels θ könnte man aufgrund der Abbildungen 5.4(c) und 5.4(d) bei $\lambda = 2,375$ und $\theta = 0$ sowie bei $\lambda = -2,375$ und $\theta = \frac{\pi}{2}$ vermuten. Wählt man jedoch $\theta = 0$ oder $\theta = \frac{\pi}{2}$, so wird keine kontinuierliche unitäre Transformation durchgeführt, da aufgrund der jeweiligen Wahl des Winkels θ bereits für $l = 0$ alle nicht teilchenzahlerhaltenden Terme verschwinden (vgl. (5.3.3)). Der Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ ist somit eine lineare Funktion bezüglich λ . Dies ändert sich jedoch, sobald man den Winkel θ nur ein wenig variiert. In diesem Fall wird Stationarität bezüglich des Lagrangeparameters λ erreicht. In Richtung θ ist der Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ eine stetige Funktion und besitzt bei $\lambda = 2,375$ und $\theta = 0$ sowie bei $\lambda = -2,375$ und $\theta = \frac{\pi}{2}$ ein Extremum. Man erreicht in den betrachteten Punkten also nahezu Stationarität bezüglich θ und λ . In dieser Gegend der $\theta - \lambda$ -Ebene existiert jedoch zumindest ein unphysikalischer Zustand (vgl. (5.3.14)), welcher gemäß (5.3.15) einen Energieeigenwert besitzt, welcher nahezu gleich dem physikalischen Grundzustand ist. Dadurch ist diese Parameterwahl äußerst ungünstig.

In Abbildung 5.4(e) und 5.4(f) ist jeweils der Betrag der Differenz von den exakten und den trunzierten Ergebnissen für $h_{0,0}$ dargestellt. Die Abbildungen zeigen, dass die Übereinstimmungen zwischen den exakten und den trunzierten Rechnungen dort am größten sind, wo der Lagrangeparameter λ gleich null ist oder zu groß gewählt wurde, um den Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ als physikalischen Grundzustand interpretieren zu können. Ebenfalls sieht man, dass die größten Abweichungen zwischen den exakten und trunzierten Rechnungen bei den in Abbildungen 5.4(c) und 5.4(d) auftretenden lokalen Minima liegen.

Zuletzt soll noch für den stationären Punkt bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ das Anregungsspektrum untersucht werden. Dazu sind in Tabelle 5.2 der Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$, die Anregungsenergie $h_{1,1}$ und die im Zweiteilchenraum hinzukommenden Energieverschiebungen für $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ aufgelistet. Zusätzlich sind ebenfalls der Wert des Koeffizienten $h_{3,3}$ sowie der Wert der **srod** aufgeführt.

Man sieht, dass im Fall dieser exakten Rechnung bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ das gewünschte Ergebnis erreicht wird. Der physikalische Grundzustand Erwartungswert von $-0,75$ ist exakt durch den Vakuum Erwartungswert $h_{0,0}$ gegeben, und die Tripletzustände sind als gebundene Zustände im Zweiteilchen-Unterraum mit dem richtigen Eigenwert von $0,25$ zu finden (vgl. Tabelle 5.1 und Tabelle 5.2).

¹In diesem Fall ist die Rechnung ebenfalls exakt.

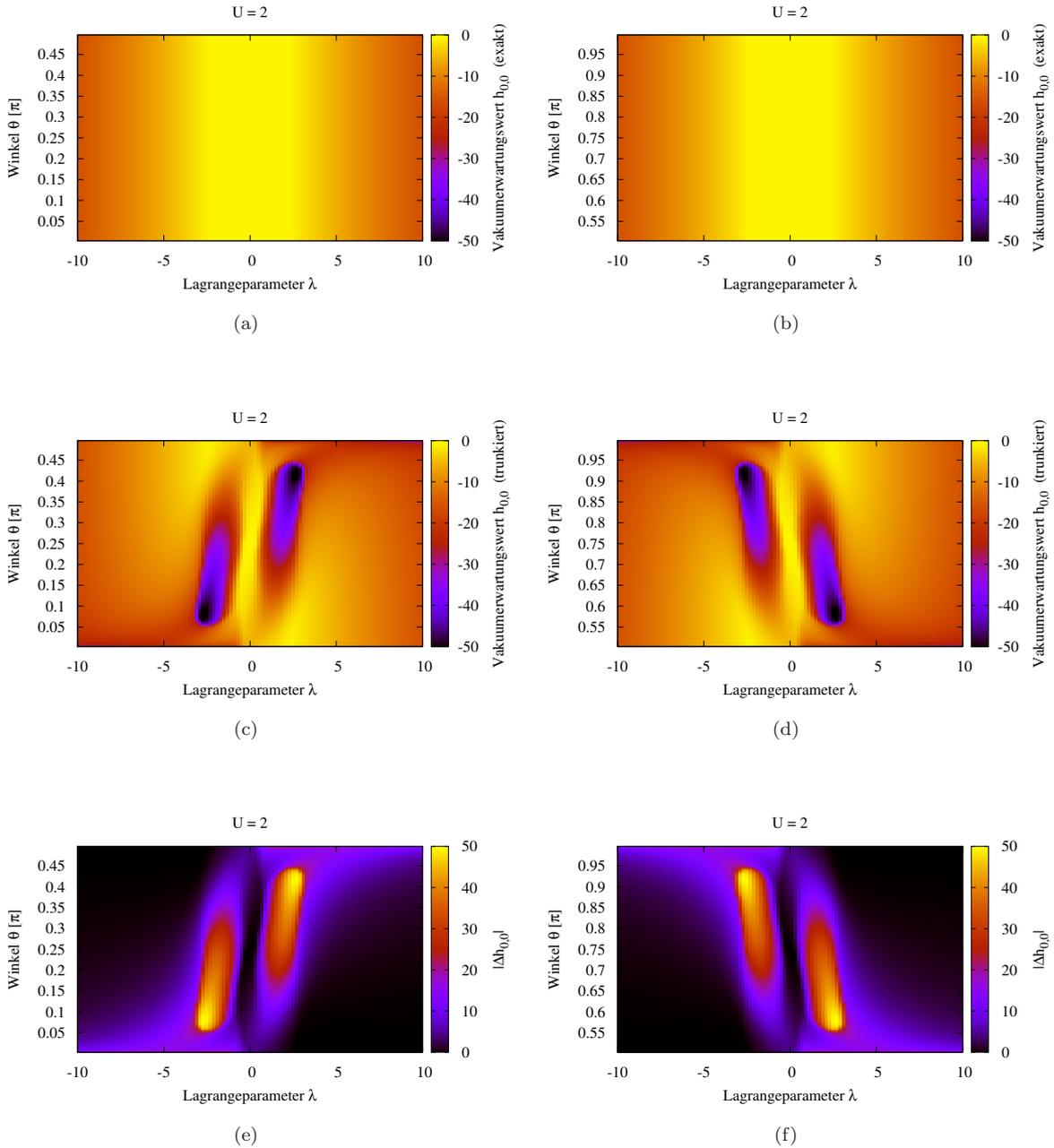


Abbildung 5.4: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 2$. Die Abbildungen 5.4(a) und 5.4(b) zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Parameter λ und θ bei $U = 2$ ohne Trunkierung. Abbildung 5.4(c) und 5.4(d) zeigen die Ergebnisse für $h_{0,0}$ im Falle der Trunkierung $h_{2,4} \equiv 0$. In Abbildung 5.4(e) und 5.4(f) wird jeweils der Betrag der Differenz zwischen den exakten und trunkierten Rechnungen $|\Delta h_{0,0}|$ dargestellt. Der Parameter J wurde stets gleich 1 gesetzt und das DGL-System bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt.

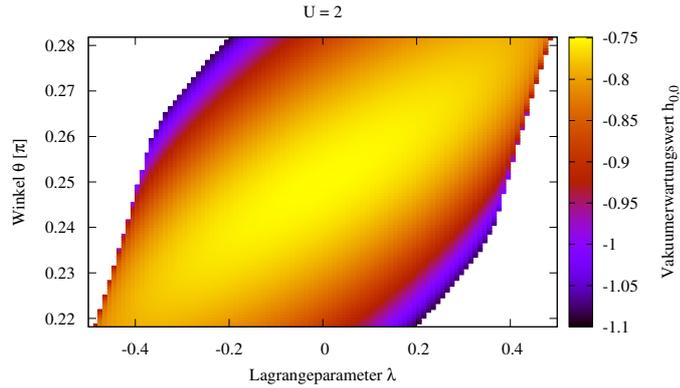


Abbildung 5.5: Umgebung des stationären Punktes von $h_{0,0}$ bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ für $U = 2$. Die Abbildung zeigt die Umgebung des stationären Punktes des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation für $U = 2$ mit Trunkierung. Der Parameter J wurde stets gleich 1 gesetzt und das DGL-System bis zu einem Wert von $l = 100$ berechnet, so dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-10}$ galt.

Zusätzlich liegen sämtliche anderen Zustände energetisch höher.

Es wurden ebenfalls sämtliche Rechnungen dieses Abschnittes für $U = 1$, $U = 3$, $U = 4$ und $U = 5$ durchgeführt, ohne dass sich qualitative Unterschiede zeigten. Bei $U = 0$ existieren noch unphysikalische Zustände, welche energetisch unterhalb der Triplett-Zustände liegen. Der physikalische Grundzustandserwartungswert wird bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ jedoch auch für $U = 0$ exakt durch den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ beschrieben.

5.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurde analog zu dem im vorherigen Kapitel behandelten bosonischen Fall zunächst eine Molekularfeld-Rechnung für das antiferromagnetische Heisenberg-Dimer in fermionischer Darstellung durchgeführt und anschließend versucht, deren Ergebnisse mit Hilfe der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern.

Ein wesentlicher Vorteil bei der Darstellung des Heisenberg-Dimers durch Fermionen anstelle von Bosonen besteht darin, dass die Dimension des Hilbertraums im fermionischen Fall endlich bleibt und es somit möglich ist, für das behandelte Heisenberg-Dimer die kontinuierlichen unitären Transformationen ohne Trunkierung durchzuführen. Allerdings wird der Hilbertraum auch bei der betrachteten fermionischen Darstellung erweitert, da jeder Spinoperator durch jeweils zwei Fermionen ersetzt wird. Somit stellt sich ebenfalls die Frage nach der Behandlung der Nebenbedingung, welche den physikalisch relevanten Unterraum definiert.

In dem Kapitel wurden die Ergebnisse des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation für den Fall $U = 2$ ausführlich dargestellt. Dabei wurden sowohl exakte als auch trunkierte Rechnungen durchgeführt. Es zeigte sich, dass die Verwendung eines Lagrangeparameters λ problematisch sein kann, da dies dazu führen kann, dass unphysikalische Zustände energetisch unterhalb des physikalischen Grundzustandserwartungswerts liegen und die kontinuierliche unitäre Transformation somit dem zugehörigen unphysikalischen Energieeigenwert den Vakuumzustand zuordnet.

Trunkiert man die Flussgleichungen, indem man den Koeffizient $h_{2,4}$ vernachlässigt, so existiert nur ein einziger stationärer Punkt bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$. Allerdings ist die Rechnung an diesem Punkt

exakt, da die gewählte Trunkierung dort keine Rolle spielt. Vernachlässigt man zusätzlich den anderen auftretenden Koeffizienten $h_{3,3}$, welcher zu Termen mit sechs Operatoren gehört, so divergiert die kontinuierliche unitäre Transformation bei dem Punkt $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$.

Neben der exakten Lösung konnte somit kein weiterer bezüglich λ und θ stationärer Punkt bestimmt werden, welcher physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefert.

Festzuhalten ist jedoch, dass die Rechnungen für den stationären Punkt bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ bei Berücksichtigung des Koeffizienten $h_{3,3}$ ein optimales Ergebnis liefern. Im folgenden Kapitel soll daher getestet werden, ob die Berücksichtigung der Koeffizienten vom Typ $h_{3,3}$ auch bei dem etwas komplexeren System des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats ausreichend ist, um gute Ergebnisse zu erzielen.

6 Untersuchung der fermionischen Darstellung des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats

Die im vorherigen Kapitel 5 durchgeführten Rechnungen für das Heisenberg-Dimer werden in diesem Kapitel in analoger Weise für das Heisenberg-Quadrat (3.3.1) durchgeführt. Insbesondere soll dabei der Einfluss der schon beim Heisenberg-Dimer durchgeführten Trunkierung untersucht werden.

6.1 Eigenschaften des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats in fermionischer Darstellung

Wie schon im vorherigen Kapitel 5 werden die Spinoperatoren gemäß (3.5.1) durch fermionische Operatoren ersetzt. Der Hamiltonoperator des antiferromagnetischen ($J > 0$) Heisenberg-Quadrats (3.3.1) nimmt dadurch die Form

$$H_0 = \sum_{\langle i,j \rangle} H_{ij} = H_{12} + H_{23} + H_{34} + H_{41} \quad (6.1.1)$$

mit

$$H_{ij} = \frac{J}{2} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right) + \frac{J}{4} \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \right) \quad (6.1.2)$$

an. Insgesamt besitzt der Hilbertraum nun $2^8 = 256$ Dimensionen und es gibt $2^4 = 16$ physikalische Eigenzustände, welche die Nebenbedingung (3.5.2) erfüllen. Die restlichen 240 Eigenzustände sind unphysikalisch.

Die z -Komponente des Gesamtspins $S_{z,\text{ges}}$ ist - wie schon im Fall des Heisenberg-Dimers - gegeben durch die Summe aller "Teilchen" minus die Anzahl aller "Löcher"

$$S_{z,\text{ges}} = \sum_{i=1}^4 \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) \quad (6.1.3)$$

Da jeder Term H_{ij} invariant unter einer Teilchen-Loch Transformation (5.1.5) ist, ist auch der gesamte Hamiltonoperator des Heisenberg-Quadrats H_0 Teilchen-Loch symmetrisch. Solange diese Symmetrie nicht gebrochen wird, gilt demnach analog zum Fall des Heisenberg-Dimers (5.1.8), dass die Nebenbedingung (3.5.2) für den Grundzustand im Mittel erfüllt ist

$$\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle - 1 = 0 \quad (6.1.4)$$

6.1.1 Addition zusätzlicher Terme zum Hamiltonoperator

Die beiden zusätzlichen Terme H_λ und H_U (vgl. Abschnitt 5.1.1) sind im Fall des Heisenberg-Quadrats gegeben durch

$$H_\lambda = \lambda \sum_{i=1}^4 \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) - 4\lambda \quad (6.1.5)$$

und

$$H_U = U \sum_{i=1}^4 \left(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - 1 \right)^2 \quad (6.1.6)$$

Wie schon beim Heisenberg-Dimer spielen diese Terme aufgrund der Teilchen-Loch Symmetrie erst bei der späteren Behandlung des Problems mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen eine Rolle und werden bei der im nächsten Abschnitt folgenden Molekularfeld-Rechnung nicht benötigt.

6.2 Molekularfeld-Rechnungen für das fermionische Heisenberg-Quadrat

Um einen geeigneten Startpunkt für die kontinuierliche unitäre Transformation zu finden, wird erneut zunächst eine Molekularfeld-Rechnung durchgeführt [Weg]. Zusätzlich werden anschließend alle Erwartungswerte von Operatoren, welche die z -Komponente des Gesamtspins nicht erhalten, gleich null gesetzt. Dies wurde im Abschnitt 5.2 für einen Term der Form (6.1.2) bereits durchgeführt. Da die Normalordnung eine lineare Abbildung ist, ist der Molekularfeld-Hamiltonoperator des Heisenberg-Quadrats (6.1.1) gegeben durch

$$H_0^{\text{MF}} = \sum_{\langle i,j \rangle} H_{ij}^{\text{MF}} = H_{12}^{\text{MF}} + H_{23}^{\text{MF}} + H_{34}^{\text{MF}} + H_{41}^{\text{MF}} \quad (6.2.1)$$

mit

$$H_{ij}^{\text{MF}} = \Gamma_1^{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger - \overline{\Gamma_1^{ij}} c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} + \Gamma_2^{ij} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger - \overline{\Gamma_2^{ij}} c_{i\downarrow} c_{j\uparrow} + \Omega^{ij} \quad . \quad (6.2.2)$$

Die Größen Γ_1^{ij} , Γ_2^{ij} und Ω^{ij} sind dabei gegeben durch

$$\Gamma_1^{ij} = -\frac{J}{2} \left[\chi_2^{ij} - \frac{1}{2} \chi_1^{ij} \right] \quad (6.2.3a)$$

$$\Gamma_2^{ij} = -\frac{J}{2} \left[\chi_1^{ij} - \frac{1}{2} \chi_2^{ij} \right] \quad (6.2.3b)$$

$$\Omega^{ij} = -\frac{J}{2} \left(\left[\overline{\chi_2^{ij}} - \frac{1}{2} \overline{\chi_1^{ij}} \right] \chi_1^{ij} + \left[\overline{\chi_1^{ij}} - \frac{1}{2} \overline{\chi_2^{ij}} \right] \chi_2^{ij} \right) \quad (6.2.3c)$$

mit

$$\chi_1^{ij} = \langle c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} \rangle \Rightarrow \overline{\chi_1^{ij}} = -\langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \quad (6.2.4a)$$

$$\chi_2^{ij} = \langle c_{i\downarrow} c_{j\uparrow} \rangle \Rightarrow \overline{\chi_2^{ij}} = -\langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \rangle \quad . \quad (6.2.4b)$$

Anders als im Falle des Dimers, bei dem der Molekularfeld-Hamiltonoperator von diesem Punkt an in aller Allgemeinheit behandelt wurde, werden nun zur Vereinfachung des Problems weitere Annahmen gemacht. Insgesamt wurden zwei mögliche selbstkonsistente Lösungen gefunden, welche in den folgenden zwei Abschnitten dargestellt und diskutiert werden.

6.2.1 Erste selbstkonsistente Lösung

Um den Molekularfeld-Hamiltonoperator (6.2.1) einfacher behandeln zu können, werden die folgenden drei Annahmen getätigt:

- Zunächst wird angenommen, dass alle auftretenden Erwartungswerte χ reell sind. Somit sind auch alle Größen Γ und Ω reell.
- Bei der Molekularfeld-Rechnung des fermionischen Heisenberg-Dimers war es möglich eine selbstkonsistente Lösung zu finden, welche die Eigenschaft $\Gamma_1 = -\Gamma_2$ besitzt (vgl. Abschnitt 5.2). Dass dies auch im Falle des fermionischen Heisenberg-Quadrats gilt, wird ebenfalls angenommen.
- Zuletzt wird noch angenommen, dass die Erwartungswerte von Operatoren, die auf den Gitterplätzen 1 und 2 (2 und 3) wirken, identisch sind mit den Erwartungswerten, bei denen die Operatoren auf den Gitterplätzen 3 und 4 (4 und 1) wirken. Es ändert sich somit bei einer "räumlichen Rotation des Quadrates um π " nichts.

Interessanterweise wird sich im Laufe der Rechnung herausstellen, dass es nicht möglich ist, eine selbstkonsistente Lösung zu finden, die invariant ist unter einer "räumlichen Rotation des Quadrates um $\frac{\pi}{2}$ ", wenn die ersten zwei Annahmen a) und b) gelten sollen. Unter den genannten drei Annahmen bleiben noch zwei mögliche Parameter $\Upsilon_1, \Upsilon_2 \in \mathbb{R}$ übrig, die selbstkonsistent zu bestimmen sind

$$\Upsilon_1 = \Gamma_1^{12} = \Gamma_1^{34} = -\Gamma_2^{12} = -\Gamma_2^{34} \quad (6.2.5a)$$

$$\Upsilon_2 = \Gamma_1^{23} = \Gamma_1^{41} = -\Gamma_2^{23} = -\Gamma_2^{41} \quad . \quad (6.2.5b)$$

Der Hamiltonoperator (6.2.1) vereinfacht sich dann zu

$$\begin{aligned} H_0^{\text{MF}} = & \Upsilon_1 \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger + c_{3\uparrow}^\dagger c_{4\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger - c_{3\downarrow}^\dagger c_{4\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + \Upsilon_2 \left(c_{2\uparrow}^\dagger c_{3\downarrow}^\dagger + c_{4\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger - c_{2\downarrow}^\dagger c_{3\uparrow}^\dagger - c_{4\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + 2(\Theta_1 + \Theta_2) \quad , \end{aligned} \quad (6.2.6)$$

wobei die Größen Θ_i gegeben sind durch

$$\Theta_i = \frac{8}{3J} \Upsilon_i^2 \quad . \quad (6.2.7)$$

Der Hamiltonoperator 6.2.6 kann nun in zwei Schritten diagonalisiert werden. Zunächst wird wie folgt eine Drehung um $\frac{\pi}{2}$ durchgeführt

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_{1\sigma} \\ \tilde{c}_{3\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{3\sigma} \\ c_{1\sigma} \end{pmatrix} \quad (6.2.8a)$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_{2\sigma} \\ \tilde{c}_{4\sigma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{4\sigma} \\ c_{2\sigma} \end{pmatrix} \quad . \quad (6.2.8b)$$

Dadurch nimmt der Hamiltonoperator die Form

$$\begin{aligned} H_0^{\text{MF}} = & (\Upsilon_1 + \Upsilon_2) \left(\tilde{c}_{1\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{2\downarrow}^\dagger - \tilde{c}_{1\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{2\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + (\Upsilon_1 - \Upsilon_2) \left(\tilde{c}_{3\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{4\downarrow}^\dagger - \tilde{c}_{3\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{4\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + 2(\Theta_1 + \Theta_2) \end{aligned} \quad (6.2.9)$$

an. In dieser Form kann der Hamiltonoperator mit der in Anhang A beschriebenen Bogoliubov-Transformation für Fermionen diagonalisiert werden. Man erhält

$$\begin{aligned} H_0^{\text{MF}} = & (\Upsilon_1 + \Upsilon_2) \sin 2\theta_+ \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \right) \\ & + (\Upsilon_1 - \Upsilon_2) \sin 2\theta_- \left(\gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow} \right) \\ & - 2(\Upsilon_1 + \Upsilon_2) \sin 2\theta_+ - 2(\Upsilon_1 - \Upsilon_2) \sin 2\theta_- + 2(\Theta_1 + \Theta_2) \quad . \end{aligned} \quad (6.2.10)$$

Die neuen fermionischen Operatoren $\gamma_{i\sigma}$ sind dabei gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow} \\ \gamma_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_+ & \sin \theta_+ \\ -\sin \theta_+ & \cos \theta_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{1\uparrow} \\ \tilde{c}_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \gamma_{1\downarrow} \\ \gamma_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_+ & -\sin \theta_+ \\ \sin \theta_+ & \cos \theta_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{1\downarrow} \\ \tilde{c}_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.2.11a)$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{3\uparrow} \\ \gamma_{4\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_- & \sin \theta_- \\ -\sin \theta_- & \cos \theta_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{3\uparrow} \\ \tilde{c}_{4\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \gamma_{3\downarrow} \\ \gamma_{4\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_- & -\sin \theta_- \\ \sin \theta_- & \cos \theta_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_{3\downarrow} \\ \tilde{c}_{4\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (6.2.11b)$$

Für die Winkel θ_+ und θ_- muss

$$(\Upsilon_1 + \Upsilon_2) \cos 2\theta_+ = 0 \quad (6.2.12a)$$

und

$$(\Upsilon_1 - \Upsilon_2) \cos 2\theta_- = 0 \quad (6.2.12b)$$

gelten, damit der Hamiltonoperator (6.2.10) eine diagonale Gestalt annimmt. Sämtliche Erwartungswerte können nun für das Quasiteilchenvakuum $|G\rangle$ berechnet werden. Dazu müssen lediglich die Operatoren $c_{i,\sigma}$ als Funktionen der Operatoren $\gamma_{i,\sigma}$ dargestellt werden. Zunächst sollte für den Grundzustand $|G\rangle$ des Molekularfeld-Hamiltonoperators (6.2.10) die Nebenbedingung (3.5.2) im Mittel erfüllt sein

$$\chi_0 = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{2} (\sin^2 \theta_+ + \sin^2 \theta_-) = \frac{1}{2}. \quad (6.2.13)$$

Beschränkt man den Wertebereich der Winkel θ_+ und θ_- auf $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]^1$, so folgt aus (6.2.12) und (6.2.13), dass

$$\theta_+, \theta_- \in \left\{ -\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4} \right\} \quad (6.2.14)$$

gelten muss. Zwar könnte bei den Gleichungen (6.2.12) anstelle der cos-Funktion auch einer der Vorfaktoren $(\Upsilon_1 + \Upsilon_2)$ oder $(\Upsilon_1 - \Upsilon_2)$ gleich null sein und somit nur ein Winkel den Betrag $\frac{\pi}{4}$ haben, jedoch muss dann gemäß Gleichung (6.2.13) auch der andere Winkel einen Betrag von $\frac{\pi}{4}$ haben. Für die übrigen Erwartungswerte erhält man

$$\chi_1^{12} = \langle c_{1\uparrow} c_{2\downarrow} \rangle = \frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ + \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15a)$$

$$\chi_2^{12} = \langle c_{1\downarrow} c_{2\uparrow} \rangle = -\frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ + \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15b)$$

$$\chi_1^{23} = \langle c_{2\uparrow} c_{3\downarrow} \rangle = \frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ - \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15c)$$

$$\chi_2^{23} = \langle c_{2\downarrow} c_{3\uparrow} \rangle = -\frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ - \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15d)$$

$$\chi_1^{34} = \langle c_{3\uparrow} c_{4\downarrow} \rangle = \frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ + \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15e)$$

$$\chi_2^{34} = \langle c_{3\downarrow} c_{4\uparrow} \rangle = -\frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ + \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15f)$$

$$\chi_1^{41} = \langle c_{4\uparrow} c_{1\downarrow} \rangle = \frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ - \sin 2\theta_-) \quad (6.2.15g)$$

$$\chi_2^{41} = \langle c_{4\downarrow} c_{1\uparrow} \rangle = -\frac{1}{4} (\sin 2\theta_+ - \sin 2\theta_-). \quad (6.2.15h)$$

¹Da alle Erwartungswerte π -periodisch sind, werden dadurch keine möglichen Lösungen vernachlässigt.

Wählt man beide Winkel θ_+ und θ_- identisch, so verschwinden die Erwartungswerte χ_i^{23} und χ_i^{41} . Dadurch existieren jedoch keine Korrelationen $\langle c_{i\sigma} c_{j\sigma'} \rangle$ mehr zwischen den Plätzen 2 und 3 sowie 4 und 1 und man betrachtet somit zwei nicht miteinander wechselwirkende Dimere (vgl. Gleichungen (6.2.15)). Alternativ dazu können die Winkel auch so gewählt werden, dass sie unterschiedliche Vorzeichen besitzen. In dem Fall sind die Erwartungswerte χ_i^{12} und χ_i^{34} gleich null. Nun verschwinden die Korrelationen zwischen Teilchen an den Plätzen 1 und 2 sowie 3 und 4, wodurch man wieder den Fall zweier nicht wechselwirkender Dimere erhält. Bis auf eine "räumliche Rotation des Quadrates um $\frac{\pi}{2}$ " sind beide Fälle identisch (vgl. Abbildung 6.1).

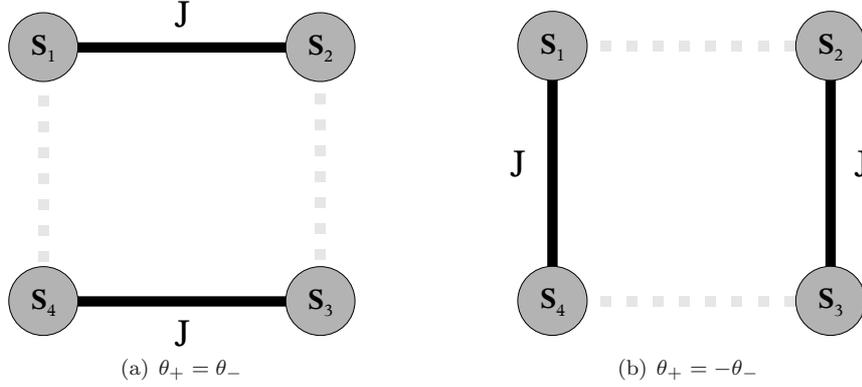


Abbildung 6.1: Illustration der Molekularfeld-Näherung. Die Abbildungen zeigen, welche Wechselwirkungen durch die Molekularfeld-Näherung vernachlässigt werden. Die vernachlässigten Wechselwirkungen sind dabei durch die hellgrauen unterbrochenen Linien dargestellt.

Im Folgenden wird daher nur noch der Fall $\theta_+ = \theta_- = \frac{\pi}{4}$ betrachtet. Die Größen Υ_i und Θ_i sind bei dieser Wahl gegeben durch

$$\Upsilon_1 = \frac{3}{8}J \quad (6.2.16a)$$

$$\Upsilon_2 = 0 \quad (6.2.16b)$$

$$\Theta_1 = \frac{3}{8}J \quad (6.2.16c)$$

$$\Theta_2 = 0 \quad , \quad (6.2.16d)$$

und der Molekularfeld-Hamiltonoperator (6.2.10) vereinfacht sich zu

$$H_0^{\text{MF}} = \frac{3J}{8} \sum_{i=1}^4 \left(\gamma_{i\uparrow}^\dagger \gamma_{i\uparrow} + \gamma_{i\downarrow}^\dagger \gamma_{i\downarrow} \right) - \frac{3J}{4} \quad . \quad (6.2.17)$$

Die Grundzustandsenergie E_0 und die Anregungsenergie ω sind demnach in Molekularfeld-Näherung gegeben durch

$$E_0 = \langle H_0^{\text{MF}} \rangle = \langle H_0 \rangle = -\frac{3}{4}J \quad (6.2.18)$$

und

$$\omega = \frac{3}{8}J \quad . \quad (6.2.19)$$

Der Molekularfeld-Hamiltonoperator (6.2.17) hätte auch leichter bestimmt werden können, indem man von Anfang an die Erwartungswerte χ_i^{12} und χ_i^{34} oder alternativ χ_i^{23} und χ_i^{41} null gesetzt hätte. Die durchgeführte Rechnung zeigt jedoch, dass unter den oben getätigten Annahmen a) bis c) sowie der Bedingung (6.2.13) keine weitere selbstkonsistente Molekularfeld-Lösung für den Hamiltonoperator (6.2.1) existiert. Insbesondere ist es nicht möglich eine selbstkonsistente Lösung zu finden, die invariant ist unter einer "räumlichen Rotation des Quadrates um $\frac{\pi}{2}$ ".

Im Rahmen der Molekularfeld-Näherung wurde in diesem Abschnitt das Heisenberg-Quadrat als zwei nicht miteinander wechselwirkende Heisenberg-Dimere behandelt.

6.2.2 Zweite selbstkonsistente Lösung

Im vorherigen Abschnitt wird das Heisenberg-Quadrat im Rahmen der Molekularfeld-Näherung als zwei nicht miteinander wechselwirkende Heisenberg-Dimere betrachtet. In diesem Abschnitt soll nun versucht werden eine Molekularfeld-Näherung zu bestimmen, in der zumindest die Beträge der Erwartungswerte (6.2.4) alle indentisch sind. Um dies zu erreichen, wird die im vorherigen Abschnitt getätigte Annahme a), dass alle Erwartungswerte reell seien, fallen gelassen. Als Ansatz für eine selbstkonsistente Lösung werden nun die Erwartungswerte

$$\chi_1^{12} = -\chi_2^{12} = \chi \quad (6.2.20a)$$

$$\chi_1^{23} = -\chi_2^{23} = i\chi \quad (6.2.20b)$$

$$\chi_1^{34} = -\chi_2^{34} = -\chi \quad (6.2.20c)$$

$$\chi_1^{41} = -\chi_2^{41} = -i\chi \quad (6.2.20d)$$

mit $\chi > 0$ gesetzt¹. Bei einer "räumlichen Rotation des Quadrates um $\frac{\pi}{2}$ " ändern sich somit die Erwartungswerte um den Faktor i . Der Molekularfeld-Hamiltonoperator (6.2.1) nimmt dadurch die Form

$$\begin{aligned} H_0^{\text{MF}} = & \Gamma \left(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger - c_{3\uparrow}^\dagger c_{4\downarrow}^\dagger - c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger + c_{3\downarrow}^\dagger c_{4\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + i\Gamma \left(c_{2\uparrow}^\dagger c_{3\downarrow}^\dagger - c_{4\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger - c_{2\downarrow}^\dagger c_{3\uparrow}^\dagger + c_{4\downarrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \\ & + 4\Omega \end{aligned} \quad (6.2.21)$$

an, wobei die Faktoren Γ und Ω gegeben sind durch

$$\Gamma = \frac{3}{4}J\chi \quad (6.2.22a)$$

$$\Omega = \frac{3}{2}J|\chi|^2 \quad (6.2.22b)$$

Dieser Hamiltonoperator (6.2.21) kann wie in Anhang A.2.3 beschrieben durch die Transformationen

$$c_{1\uparrow} = -\frac{i}{2}\gamma_{1\uparrow} + \frac{1}{2}\gamma_{3\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{4\downarrow}^\dagger \quad (6.2.23a)$$

$$c_{2\downarrow} = -\frac{i}{2}\gamma_{2\downarrow} - \frac{1}{2}\gamma_{4\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{3\uparrow}^\dagger \quad (6.2.23b)$$

$$c_{3\uparrow} = -\frac{1}{2}\gamma_{1\uparrow} + \frac{i}{2}\gamma_{3\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{2\downarrow}^\dagger \quad (6.2.23c)$$

$$c_{4\downarrow} = +\frac{1}{2}\gamma_{2\downarrow} + \frac{i}{2}\gamma_{4\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{1\uparrow}^\dagger \quad (6.2.23d)$$

¹Eine Molekularfeld-Lösung, bei der alle auftretenden Erwartungswerte den gleichen Betrag besitzen, wurde ebenfalls von Affleck und Marston untersucht. Sie bezeichneten diese Lösung als Flussphase [AM88].

und

$$c_{1\downarrow} = +\frac{i}{2}\gamma_{1\downarrow} - \frac{1}{2}\gamma_{3\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{4\uparrow}^\dagger \quad (6.2.23e)$$

$$c_{2\uparrow} = +\frac{i}{2}\gamma_{2\uparrow} + \frac{1}{2}\gamma_{4\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{3\downarrow}^\dagger \quad (6.2.23f)$$

$$c_{3\downarrow} = +\frac{1}{2}\gamma_{1\downarrow} - \frac{i}{2}\gamma_{3\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{2\uparrow}^\dagger \quad (6.2.23g)$$

$$c_{4\uparrow} = -\frac{1}{2}\gamma_{2\uparrow} - \frac{i}{2}\gamma_{4\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{1\downarrow}^\dagger \quad (6.2.23h)$$

diagonalisiert werden. Die so definierten Operatoren $\gamma_{i,\sigma}$ sind ebenfalls fermionische Operatoren. Berechnet man den Erwartungswert χ_0 bezüglich des durch die Operatoren $\gamma_{i,\sigma}$ definierten Vakuums $|G\rangle$, so erhält man

$$\chi_0 = \frac{1}{2} \quad . \quad (6.2.24)$$

Die Nebenbedingung (3.5.2) ist somit wie gefordert im Mittel erfüllt. Ebenfalls kann der Erwartungswert χ bezüglich des Vakuums $|G\rangle$ berechnet werden. Es gilt

$$\chi = \frac{1}{2\sqrt{2}} \quad (6.2.25)$$

$$\Rightarrow \Gamma = \frac{3}{8\sqrt{2}}J \quad \text{und} \quad \Omega = \frac{3}{16}J \quad . \quad (6.2.26)$$

Insgesamt erhält man dadurch einen Molekularfeld-Hamiltonoperator

$$H_0^{\text{MF}} = E_0 + \sum_{i=1}^4 \omega \left(\gamma_{i\uparrow}^\dagger \gamma_{i\uparrow} + \gamma_{i\downarrow}^\dagger \gamma_{i\downarrow} \right) \quad , \quad (6.2.27)$$

wobei die Molekularfeld-Grundzustandsenergie E_0 gegeben ist durch

$$E_0 = \langle H_0^{\text{MF}} \rangle = \langle H_0 \rangle = 4 \left(\Omega - \sqrt{2}\Gamma \right) = -\frac{3}{4}J \quad . \quad (6.2.28)$$

Die Anregungsenergie ω besitzt den Wert

$$\omega = \sqrt{2}\Gamma = \frac{3}{8}J \quad . \quad (6.2.29)$$

Diese Ergebnisse stimmen mit denen der Molekularfeld-Rechnung des vorherigen Abschnitts überein. Für beide betrachteten selbstkonsistenten Lösungen weicht die Molekularfeld-Grundzustandsenergie somit deutlich von der exakten Grundzustandsenergie des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats von $-2J$ ab.

In den folgenden Abschnitten soll nun versucht werden, beide für das fermionische Heisenberg-Quadrat durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen mit Hilfe der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern.

6.3 Verbesserung der Molekularfeld-Rechnungen mit Hilfe kontinuierlicher unitärer Transformationen

In diesem Abschnitt wird versucht, die zuvor durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen aus Abschnitt 6.2.1 und 6.2.2 durch die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen zu verbessern. Dazu werden alle Operatoren des Hamiltonoperators

$$H_{\lambda,U} = H_0 + H_\lambda + H_U \quad (6.3.1)$$

gemäß der jeweiligen Molekularfeld-Rechnung transformiert und anschließend normalgeordnet. Bei der Normalordnung werden wie schon zuvor die Operatoren so lange kommutiert, bis alle teilchenerzeugenden Operatoren einer Sorte Fermionen links von den entsprechenden teilchenvernichtenden Operatoren stehen. Der Hamiltonoperator, der aus $H_{\lambda,U}$ durch die Transformation

$$\begin{pmatrix} c_{1\uparrow} \\ c_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow} \\ \gamma_{2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_{1\downarrow} \\ c_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{1\downarrow} \\ \gamma_{2\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.3.2a)$$

$$\begin{pmatrix} c_{3\uparrow} \\ c_{4\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{3\uparrow} \\ \gamma_{4\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_{3\downarrow} \\ c_{4\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{3\downarrow} \\ \gamma_{4\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.3.2b)$$

sowie der nachfolgenden Normalordnung entsteht, wird im Folgenden mit $H_{\lambda,U}^a$ und die zugehörige Transformation (6.3.2) als Transformation a) bezeichnet. Diese Transformation a) entspricht gerade der in Abschnitt 6.2.1 verwendeten Transformation, welche zur Diagonalisierung des Molekularfeld-Hamiltonoperators (6.2.6) im Fall $\theta = \theta_+ = \theta_-$ verwendet wurde. Die bei der Molekularfeld-Rechnung durchgeführte Drehung um $\frac{\pi}{2}$ (6.2.8) lässt den Hamiltonoperator H_0 invariant und braucht demnach nicht berücksichtigt werden. In Anhang C ist der durch die Transformation a) entstehende Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ dargestellt.

Der durch die in Abschnitt 6.2.2 verwendete Transformation

$$c_{1\uparrow} = -\frac{i}{2}\gamma_{1\uparrow} + \frac{1}{2}\gamma_{3\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{4\downarrow}^\dagger \quad (6.3.3a)$$

$$c_{2\downarrow} = -\frac{i}{2}\gamma_{2\downarrow} - \frac{1}{2}\gamma_{4\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{3\uparrow}^\dagger \quad (6.3.3b)$$

$$c_{3\uparrow} = -\frac{1}{2}\gamma_{1\uparrow} + \frac{i}{2}\gamma_{3\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{2\downarrow}^\dagger \quad (6.3.3c)$$

$$c_{4\downarrow} = +\frac{1}{2}\gamma_{2\downarrow} + \frac{i}{2}\gamma_{4\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{1\uparrow}^\dagger \quad (6.3.3d)$$

$$c_{1\downarrow} = +\frac{i}{2}\gamma_{1\downarrow} - \frac{1}{2}\gamma_{3\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{4\uparrow}^\dagger \quad (6.3.3e)$$

$$c_{2\uparrow} = +\frac{i}{2}\gamma_{2\uparrow} + \frac{1}{2}\gamma_{4\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{3\downarrow}^\dagger \quad (6.3.3f)$$

$$c_{3\downarrow} = +\frac{1}{2}\gamma_{1\downarrow} - \frac{i}{2}\gamma_{3\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{2\uparrow}^\dagger \quad (6.3.3g)$$

$$c_{4\uparrow} = -\frac{1}{2}\gamma_{2\uparrow} - \frac{i}{2}\gamma_{4\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_{1\downarrow}^\dagger \quad (6.3.3h)$$

sowie die anschließende Normalordnung aus $H_{\lambda,U}$ entstehende Hamiltonoperator wird mit $H_{\lambda,U}^b$ bezeichnet und ist ebenfalls in Anhang C dargestellt. Die Transformation (6.3.3) wird im Folgenden als Transformation b) bezeichnet. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass durch diese Transformation Terme entstehen, welche komplexe Vorfaktoren besitzen (vgl. Gleichung (C.2.1)). Dadurch müssen bei der späteren Integration der Flussgleichung doppelt so viele Variablen behandelt werden, da jeder Koeffizient durch einen Real- und Imaginärteil beschrieben wird.

Für beide Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ soll nun mittels der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen und der Verwendung des Knetter-Uhrig-Generators ein teilchenzahlerhaltender effektiver Hamiltonoperator erzeugt werden. Während die in Abschnitt 4.3 und Abschnitt 5.3 dargestellten Flussgleichungen noch mit relativ geringem Aufwand auch ohne Einsatz eines Rechners bestimmt werden können, ist dies für die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ aufgrund der hohen Anzahl an auftretenden Termen nicht mehr empfehlenswert. Dies gilt insbesondere dann, wenn keine Trunkierung durchgeführt wird. Daher wurde das Aufstellen der Flussgleichungen (2.1.5) durch das

in Abschnitt 2.6.1 beschriebene C++ Programm durchgeführt. Zur anschließenden Integration der Flussgleichung wurden Runge-Kutta Methoden verwendet [PTVF02]. Der Parameter J wurde bei sämtlichen numerischen Rechnungen gleich eins gesetzt.

Sowohl Transformation a) als auch Transformation b) lassen die z -Komponente des Gesamtspins (6.1.3) invariant. Aufgrund der Struktur des Knetter-Uhrig-Generators wird ebenfalls während der kontinuierlichen unitären Transformation die z -Komponente des Gesamtspins nicht verändert (vgl. Anhang B). Somit können - wie schon in den vorherigen Kapiteln 4 und 5 - physikalisch relevante Zustände nach der kontinuierlichen unitären Transformation nur in Unterräumen mit gerader Teilchenzahl liegen.

Im folgenden Abschnitt sollen zunächst die nicht trunkierten Flussgleichungen untersucht werden.

6.3.1 Ergebnisse im Fall der nicht trunkierten Flussgleichungen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der exakten Rechnungen (nicht trunkierte Flussgleichungen) für beide Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ für $\lambda = 0$ und $U = 5$ vorgestellt. Der bei der Transformation a) zusätzlich vorhandene Winkel θ wurde gemäß der zuvor durchgeführten Molekularfeld-Rechnung gleich $\frac{\pi}{4}$ gesetzt. Zunächst wurden die Flussgleichungen für die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ ohne Berücksichtigung irgendwelcher Symmetrien aufgestellt. Es wurde somit jedem Term ein Koeffizient zugeordnet.

Während im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ die Flussgleichung ohne Probleme konvergierte und leicht ein effektiver Hamiltonoperator bestimmt werden konnte, dessen **srod** kleiner als 10^{-10} ist (vgl. Abbildung 6.2(a)), war dies für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ nicht möglich. Erst nachdem beim Aufstellen der Flussgleichungen explizit verwendet wurde, dass der Hamiltonoperator hermitesch ist, war es möglich, zumindest einen effektiven Hamiltonoperator zu bestimmen, welcher einen Wert **srod** besitzt, der kleiner als 10^{-4} ist.

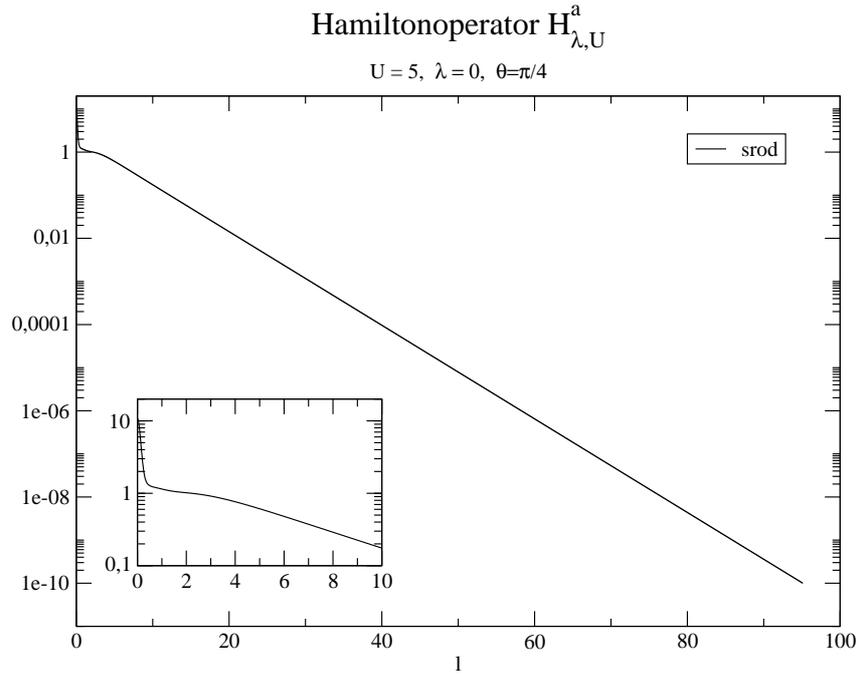
Das Verhalten der **srod** für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ ist in Abbildung 6.2(b) sowohl für den Fall ohne Verwendung irgendeiner Symmetrie dargestellt, als auch für den Fall, dass die Symmetrie der Koeffizienten der Flussgleichung berücksichtigt wurde, welche aufgrund der Hermitezität des Hamiltonoperators existiert. Zusätzlich sind in Abbildung 6.2(b) für beide Fälle die Größen **srod**₂ wie auch **srod**₄ aufgeführt. Dabei werden in **srod**₂ (**srod**₄) nur die nicht teilchenzahlerhaltenden Terme berücksichtigt, welche die Teilchenzahl um zwei (vier) verändern. Man sieht einen qualitativen¹ Unterschied zwischen den Kurven, in denen die Hermitezität des Hamiltonoperators beim Aufstellen der Flussgleichung verwendet wurde, (schwarze Kurven) und den Kurven, bei denen diese Symmetrie nicht explizit verwendet wurde (blaue Kurven). Zwar steigt die **srod** in beiden Fällen bei $l \approx 4$ noch einmal an, zeigt aber divergentes Verhalten nur im Fall ohne explizite Berücksichtigung der Hermitezität.

In Abbildung 6.3(a) und Abbildung 6.3(b) ist die Zusammensetzung der **srod** genauer aufgeschlüsselt. Dabei werden in **srod** _{$i-j$} nur die nicht teilchenzahlerhaltenden Terme berücksichtigt, welche einen Zustand aus i Teilchen mit einem Zustand aus j Teilchen verbinden. Die Abbildung 6.3(a) zeigt deutlich, dass für das erneute Ansteigen der **srod** Terme verantwortlich sind, die Zustände aus sechs Teilchen mit Zuständen aus acht Teilchen verbinden. Sämtliche Koeffizienten, welche zu Termen gehören, die die Teilchenzahl um vier Teilchen ändern, konvergieren hingegen ohne diesen Anstieg zu spüren (vgl. Abbildung 6.3(b)). Sie scheinen damit von den Termen, welche die Teilchenzahl um zwei verändern, abgekoppelt zu sein.

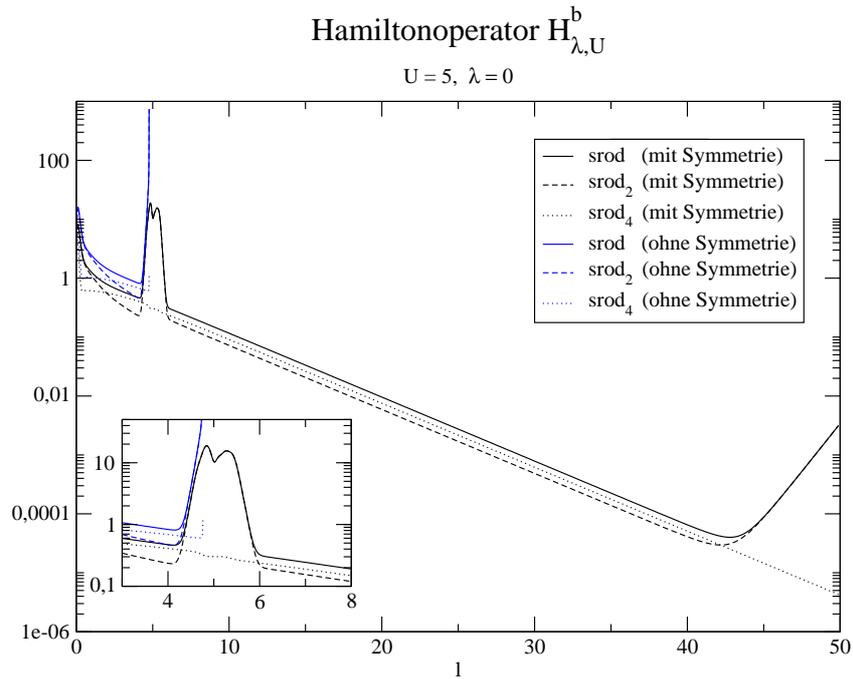
Das Auftreten eines divergenten Verhaltens bei der Behandlung des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ ohne Berücksichtigung der Hermitezität kann nur durch numerische Fehler bei der Integration der Flussgleichung erklärt werden, da alle Voraussetzungen für die Konvergenz der Flussgleichung erfüllt sind (vgl. Abschnitt 2.4). In Abschnitt 5.3.1 aus Kapitel 5 wurde zwar gezeigt, dass eine Trunkierung dazu führen kann, dass die Flussgleichung divergiert; hier jedoch wurde keine Trunkierung durchgeführt und die Flussgleichung exakt aufgestellt, so dass die theoretischen Aussagen aus Abschnitt 2.4 für den Knetter-Uhrig-Generator gelten müssen.

Vernachlässigt man jedoch bei dem Aufstellen der Flussgleichung Symmetrien, so kann dies durch-

¹Ein quantitativer Unterschied ist aufgrund der unterschiedlichen Anzahl der nicht teilchenzahlerhaltenden Terme vorhanden.



(a)



(b)

Abbildung 6.2: Entwicklung der **srod** während der kontinuierlichen unitären Transformation für die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$. Die Abbildungen zeigen die Entwicklung der **srod** während der kontinuierlichen unitären Transformation sowohl für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ als auch für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ für die Parameter $\lambda = 0, U = 5$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$. Die Flussgleichungen wurden dabei nicht trunziert und der Parameter J gleich 1 gesetzt.

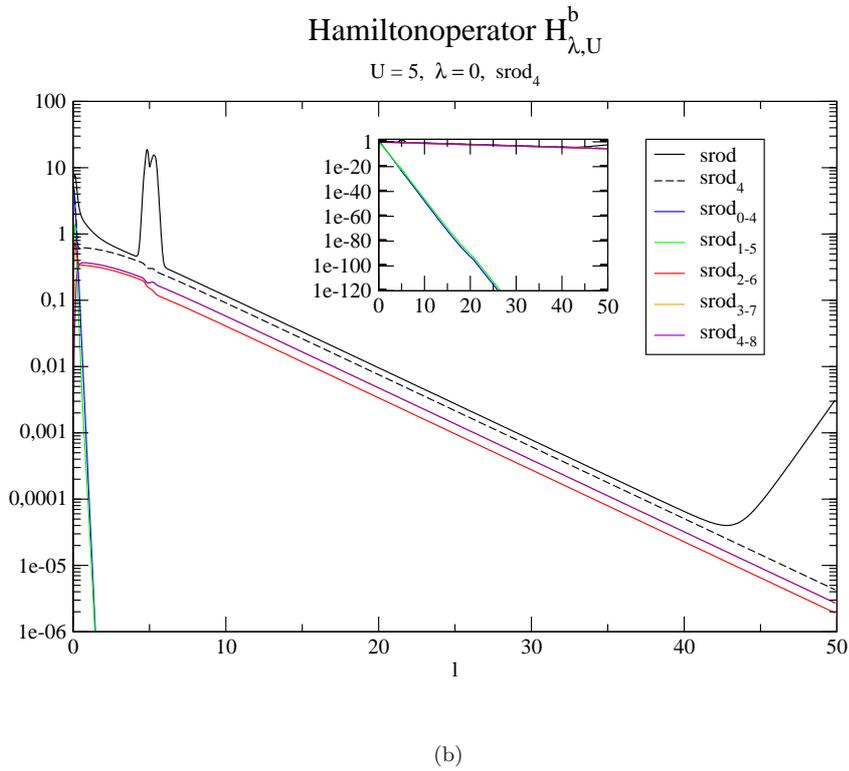
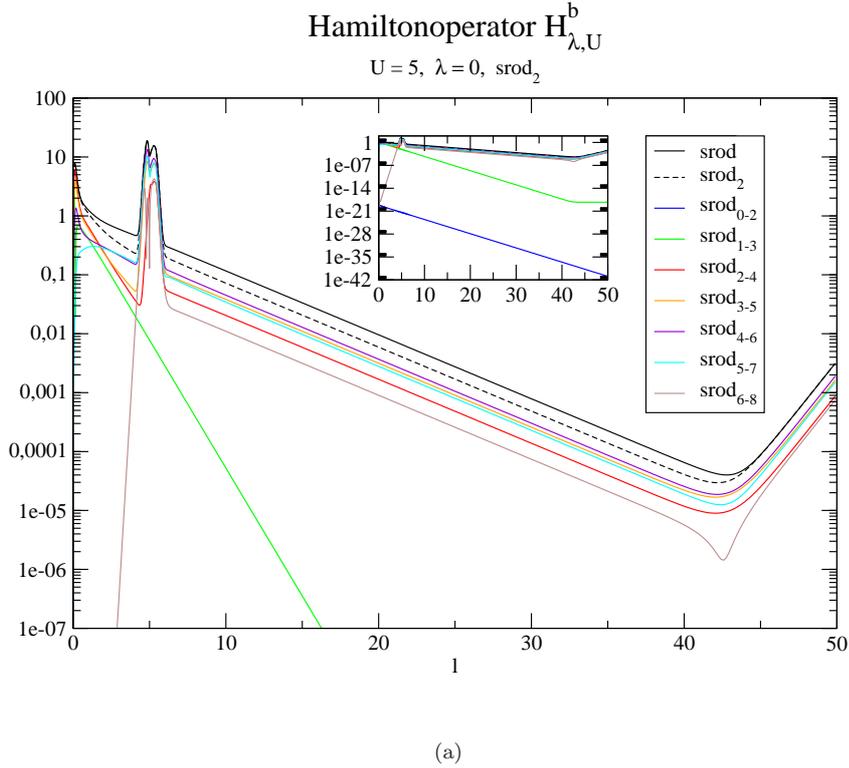


Abbildung 6.3: Zusammensetzung der **srod** während der kontinuierlichen unitären Transformation für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$. Die Abbildungen zeigen den Verlauf der Größen **srod** $_{i-j}$ während der kontinuierlichen unitären Transformation für die Parameter $\lambda = 0$ und $U = 5$. In Abbildung a) (Abbildung b)) werden die Terme berücksichtigt, welche die Teilchenzahl um zwei (vier) ändern. Die Flussgleichung wurde dabei nicht trunziert und der Parameter J gleich 1 gesetzt.

aus dazu führen, dass die Flussgleichung bei einer numerischen Behandlung divergiert. Es wäre zum Beispiel denkbar, dass beim Aufstellen der Flussgleichung durch die Vernachlässigung einer Symmetrie ein Term erzeugt wird, welcher bei einer Berücksichtigung der entsprechenden Symmetrie nicht erzeugt werden würde. Bei einer exakten Behandlung der Flussgleichung wäre dies kein Problem, da die zugehörige rechte Seite aufgrund der Symmetrie während der gesamten Transformation null bleiben würde. Bei einer numerischen Behandlung ist es jedoch eher unwahrscheinlich, dass die Terme der entsprechenden rechten Seite exakt null ergeben. Eine kleine Abweichung von null könnte dann zu einem abweichenden Verhalten der kontinuierlichen unitären Transformation und somit auch zur Divergenz der Flussgleichung führen.

Wird derart die Symmetrie der Koeffizienten, welche aufgrund der Hermitezität der Flussgleichung existiert, gebrochen, so führt dies insbesondere dazu, dass der Generator nicht mehr antihermitisch ist und somit auch keine unitäre Transformation mehr erzeugt. Dadurch lässt sich die in Abbildung 6.2(b) auftretende Divergenz erklären.

Das Brechen einer anderen Symmetrie in den Koeffizienten der Flussgleichung könnte ebenfalls der Grund für den erneuten Anstieg der **srod** bei $l \approx 44$ (vgl. Abbildung 6.2(b)) sein. Dies wurde jedoch nicht weiter untersucht.

Im Folgenden wird das Spektrum nach der kontinuierlichen unitären Transformation untersucht. Aufgrund des relativ großen Wertes $U = 5$ sind die Erwartungswerte der nicht physikalischen Zustände im Zweiteilchen- und Vierteilchen-Unterraum alle größer oder gleich 9,25, so dass nach der kontinuierlichen unitären Transformation und einer anschließenden Diagonalisierung im jeweiligen Unterraum mit fester Teilchenzahl die physikalischen Energieeigenwerte (vgl. Tabelle 3.2) ohne Schwierigkeiten identifiziert werden können.

In Tabelle 6.1 sind die berechneten Ergebnisse für die physikalischen Eigenwerte für beide Starthamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation dargestellt. Dabei wurden die Energieeigenwerte in jedem Unterraum mit unterschiedlicher Teilchenzahl separat berechnet, so dass ebenfalls angegeben werden kann, in welchem Unterraum mit fester Teilchenzahl der jeweilige Eigenwert zu finden ist. Insbesondere wurden somit die nicht teilchenzahlerhaltenden Koeffizienten, die nach der kontinuierlichen unitären Transformation nahezu null ($< \mathbf{srod}$) sind, vernachlässigt.

Die so bestimmten physikalischen Energieeigenwerte stimmen gut mit den exakten Werten überein. Der maximale absolute Fehler hat die Größenordnung 10^{-5} (vgl. Tabelle 6.1).

Es ist bemerkenswert, dass je nach Wahl des Starthamiltonoperators die Eigenzustände unterschiedlich angeordnet werden, so dass sich im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ nach der kontinuierlichen unitären Transformation noch mehr physikalische Zustände im Vierteilchen-Unterraum befinden als für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$. Es scheint also im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ eine Symmetrie zu geben, die dafür sorgt, dass die Zustände im Vierteilchen-Unterraum verweilen, obwohl im Zweiteilchen-Unterraum unphysikalische Zustände liegen, die energetisch höher liegen (vgl. Abschnitt 2.5.2).

In beiden Fällen befinden sich mindestens zwei physikalische Zustände auch nach der kontinuierlichen unitären Transformation noch im Vierteilchen-Unterraum. Dies lässt sich durch die Erhaltung der z -Komponente des Gesamtspins erklären. Es existieren genau zwei physikalische Zustände deren Quantenzahl m_{ges} den Betrag zwei besitzt (vgl. Tabelle 3.2). Eine solche Quantenzahl kann jedoch gemäß Gleichung (6.1.3) nur durch Zustände im Vierteilchen-Unterraum erreicht werden, da die z -Komponente des Gesamtspins erhalten bleibt.

Im nächsten Abschnitt soll der Einfluss einer Trunkierung auf die Ergebnisse untersucht werden.

Tabelle 6.1: Physikalische Eigenwerte des Heisenberg-Quadrats nach der kontinuierlichen unitären Transformation. (Die exakten Eigenwerte sind in Klammern dargestellt (vgl. Abschnitt 3.3).)

| Hamiltonoperator | $H_{\lambda,U}^a$ | $H_{\lambda,U}^b$ |
|------------------------|-------------------|---------------------|
| <i>l</i> -Wert | ≈ 95 | 40 |
| srod | $< 10^{-10}$ | $6,8 \cdot 10^{-5}$ |
| Vakuum | -2,000000 (-2) | -2,000000 (-2) |
| Zweiteilchen-Unterraum | -1,000000 (-1) | -1,000000 (-1) |
| | -1,000000 (-1) | -1,000000 (-1) |
| | -1,000000 (-1) | -0,999999 (-1) |
| | 0,000000 (0) | 0,000000 (0) |
| | 0,000000 (0) | 0,000000 (0) |
| | 0,000000 (0) | 0,000000 (0) |
| | | 0,000000 (0) |
| | | 0,000000 (0) |
| | | 0,000012 (0) |
| | | 1,000000 (1) |
| Vierteilchen-Unterraum | | 1,000000 (1) |
| | -0,000006 (0) | 1,000000 (1) |
| | -0,000004 (0) | |
| | 0,000000 (0) | |
| | 0,000000 (0) | |
| | 0,999986 (1) | |
| | 0,999998 (1) | |
| | 0,999998 (1) | |
| 1,000000 (1) | | |
| 1,000000 (1) | | |

6.3.2 Ergebnisse im Fall trunkierter Flussgleichungen bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$

Im vorherigen Abschnitt 6.3.1 wurden keinerlei Trunkierungen durchgeführt. Möchte man jedoch größere Systeme behandeln, so wird es notwendig werden, die Flussgleichungen zu trunkieren. Dies wird offensichtlich, wenn man die Anzahl der Koeffizienten der jeweiligen Flussgleichung betrachtet. Führt man keine Trunkierung durch, so besitzt die Flussgleichung für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ 1775 Koeffizienten und im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ sogar 4833 komplexe Koeffizienten. Durch Verwendung der Hermitezität verringert sich die Anzahl der Koeffizienten zwar auf 1115 für $H_{\lambda,U}^a$ bzw. auf 2543 komplexe Koeffizienten für $H_{\lambda,U}^b$. Dies sind allerdings immer noch recht große DGL-Systeme, wenn man berücksichtigt, dass man mit dem Heisenberg-Quadrat ein ursprünglich 16 dimensionales Problem behandelt.

Daher soll im Folgenden der Einfluss einer Trunkierung auf die Ergebnisse untersucht werden. Bei der Untersuchung des Heisenberg-Dimers im vorherigen Kapitel 5 zeigte sich, dass es für die Konvergenz der Flussgleichung günstig sein kann, neben den Termen, die aus bis zu vier Operatoren bestehen, die Terme ebenfalls zu berücksichtigen, die aus drei Erzeugern und drei Vernichtern aufgebaut sind. Diese Art der Trunkierung wird im Folgenden auch für die Behandlung des Heisenberg-Quadrats verwendet.

Unter Berücksichtigung der Hermitezität ergeben sich so DGL-Systeme, welche im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ aus 197 Koeffizienten und im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ aus 443 komplexen

Koeffizienten bestehen.

Im vorherigen Kapitel 5 lag der einzige stationäre Punkt des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ in der $\lambda\theta$ -Ebene bei dem durch die Molekularfeld-Rechnung ermittelten Punkt $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$. Daher werden zunächst für die durch die Molekularfeld-Rechnung ermittelten Parameter Rechnungen durchgeführt. Im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ wird demnach der Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ und der Lagrangeparameter $\lambda = 0$ gesetzt. Durch diese Wahl besitzt der Starthamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ keine Terme, welche die Teilchenzahl um zwei ändern, wodurch sich die Anzahl der Koeffizienten der Flussgleichung noch weiter reduziert. Es bleiben 137 Koeffizienten übrig. Im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ wird der Lagrangeparameter $\lambda = 0$ gesetzt.

Für beide Fälle soll nun gemäß Gleichung (4.3.13) ein Punkt bestimmt werden, indem der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ bezüglich des Parameters U minimale Steigung besitzt.

In Abbildung 6.4 ist die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von der Wahl des Parameters U nach der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation für beide Starthamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ dargestellt. Zum Vergleich sind ebenfalls die Ergebnisse für den Vakuumerwartungs-

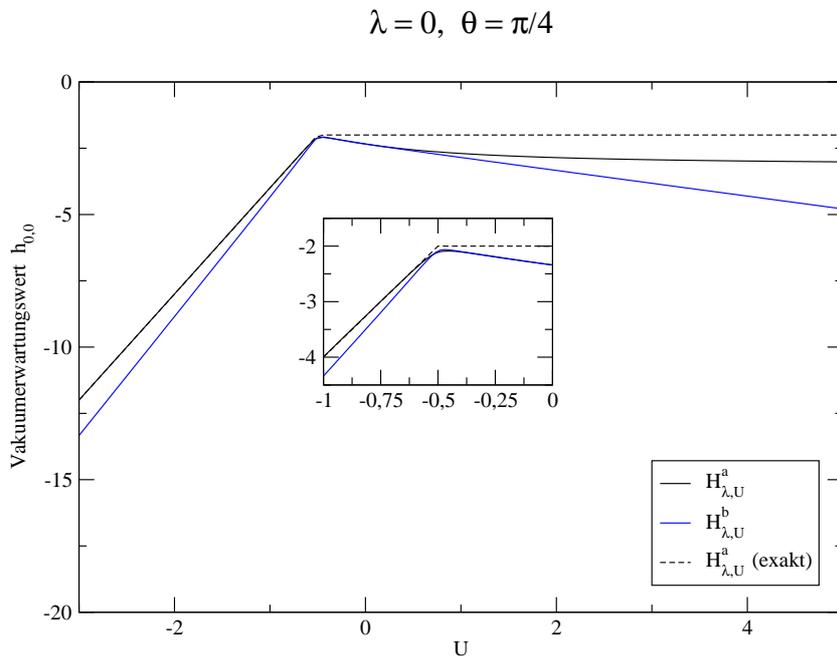


Abbildung 6.4: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem Parameter U . Die Abbildung zeigt den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion des Parameters U bei festem Lagrangeparameter $\lambda = 0$ für die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$. Im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ wurde der Winkel $\theta = \frac{\pi}{4}$ gesetzt. Zusätzlich ist der Verlauf von $h_{0,0}$ für eine nicht trunkierte Flussgleichung dargestellt. Der Parameter J wurde gleich 1 gesetzt und die Flussgleichung so weit berechnet, dass in jedem Fall $\mathbf{srod} < 10^{-5}$ galt.

wert $h_{0,0}$ im Fall einer exakten Behandlung des Problems dargestellt.

Wie schon in Abschnitt 4.3.1, in dem die Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von U für die bosonische Darstellung des Heisenberg-Dimers untersucht wurde, wird erneut aufgrund der Trunkierung die Ungleichung (4.3.13) verletzt, da ab einem gewissen U -Wert die Ableitung $\partial_U h_{0,0}$ für beide betrachteten Starthamiltonoperatoren negativ wird. Es ergibt sich dadurch jeweils ein sta-

tionärer Punkt bezüglich des Parameters U . Im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ liegt dieser bei etwa $U = -0,451$ mit einem Vakuumerwartungswert $h_{0,0} = -2,089$. Für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ liegt der stationäre Punkt bei $U = -0,47$ und der Vakuumerwartungswert nimmt dort den Wert $h_{0,0} = -2,064$ an. Auch für den U -Term kann man so argumentieren, dass in einem stationären Punkt die Nebenbedingung 3.5.2 im Mittel erfüllt ist. Allerdings liegt in beiden Fällen der stationäre Punkt in einem Bereich, in dem der Parameter U negativ ist. Dadurch werden gerade die Energieeigenwerte unphysikalischer Zustände energetisch abgesenkt. Das Problem der Identifikation der physikalischen Zustände wird daher noch vergrößert. Für $U = 0$ liegt die Abweichung des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von dem exakten physikalischen Grundzustandserwartungswert in beiden Fällen bereits über 10%.

In Tabelle 6.2 sind neben dem Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ ebenfalls sämtliche Eigenwerte des Zweiteilchen-Unterraums nach der kontinuierlichen unitären Transformation für unterschiedliche Werte U dargestellt.

Tabelle 6.2: Eigenwerte des Heisenberg-Quadrats nach der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation. Die Ergebnisse der nicht trunkierten Rechnungen sind in Tabelle 6.1 dargestellt.

| Hamiltonoperator | $H_{\lambda,U}^a$ bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ | | | | $H_{\lambda,U}^b$ bei $\lambda = 0$ | | | |
|----------------------------|--|---------------------|---------------------|---------------------|-------------------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| U -Wert | -0,451 | 0 | 3 | 5 | -0,47 | 0 | 3 | 5 |
| srod | $9,1 \cdot 10^{-6}$ | $8,8 \cdot 10^{-6}$ | $8,6 \cdot 10^{-6}$ | $9,5 \cdot 10^{-6}$ | $9,5 \cdot 10^{-6}$ | $9,9 \cdot 10^{-6}$ | $9,6 \cdot 10^{-6}$ | $9,5 \cdot 10^{-6}$ |
| Vakuum | -2,089 | -2,340 | -2,933 | -3,013 | -2,064 | -2,340 | -3,821 | -4,788 |
| Zweiteilchen- Unterraum | -1,850 | -1,700 | -2,908 | -3,084 | -2,030 | -1,700 | -4,682 | -6,617 |
| | -1,850 | -1,700 | -2,908 | -3,084 | -1,911 | -1,700 | -4,682 | -6,617 |
| | -1,850 | -1,700 | -2,908 | -3,084 | -1,911 | -1,700 | -4,682 | -6,617 |
| | -1,850 | -0,852 | 0,939 | 1,066 | -1,911 | -0,852 | -0,893 | -1,906 |
| | -1,850 | -0,852 | 0,939 | 1,066 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,850 | -0,852 | 0,939 | 1,066 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,422 | -0,852 | 4,581 | 8,511 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,422 | -0,852 | 4,581 | 8,511 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,422 | -0,852 | 4,581 | 8,511 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,422 | -0,852 | 4,581 | 8,511 | -1,751 | -0,852 | 3,111 | 4,884 |
| | -1,092 | -0,852 | 5,230 | 9,236 | -1,054 | -0,852 | 3,554 | 6,269 |
| | -1,092 | -0,852 | 5,230 | 9,236 | -1,054 | -0,852 | 3,554 | 6,269 |
| | -1,092 | -0,852 | 5,230 | 9,236 | -1,054 | -0,852 | 3,554 | 6,269 |
| | -0,793 | 0,072 | 5,230 | 9,236 | -0,842 | -0,072 | 3,554 | 6,269 |
| | -0,793 | 0,072 | 5,230 | 9,236 | -0,842 | -0,072 | 3,554 | 6,269 |
| | -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,433 | 9,613 |
| | -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,433 | 9,613 |
| | -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,433 | 9,613 |
| | -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,859 | 9,714 |
| | -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,859 | 9,714 |
| -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,859 | 9,714 | |
| -0,793 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,842 | -0,072 | 5,859 | 9,714 | |
| -0,433 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,739 | -0,072 | 5,859 | 9,714 | |
| -0,433 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,739 | -0,072 | 5,859 | 9,714 | |
| -0,433 | 0,072 | 6,009 | 10,001 | -0,739 | -0,072 | 5,859 | 9,714 | |

Auch im Zweiteilchen-Unterraum existieren demnach deutliche Abweichungen von dem exakten physikalischen Eigenwertspektrum.

Ab einem Wert $U < -0,5$ liegt der Eigenwert des unphysikalischen Zustandes $|0\rangle$, der durch das Vakuum der ursprünglichen Operatoren $c_{i\sigma}$ gegeben ist, unterhalb des physikalischen Grundzustandserwartungswerts. Dies macht sich sehr deutlich bei der nicht trunkierten Rechnung bemerkbar, welche genau bei $U = -0,5$ einen Knick besitzt.

Verwendung eines alternativen Generators

Es wurde ebenfalls die Verwendung eines alternativen Generators untersucht, in dem nur Terme berücksichtigt wurden, die entweder ausschließlich aus Erzeugern oder Vernichtern bestehen (vgl. Abschnitt 2.5.4). Durch die betrachtete Trunkierung ist die maximale Anzahl der Operatoren pro Term für den Generator zusätzlich auf vier beschränkt. Die beim Knetter-Uhrig-Generator ebenfalls berücksichtigten Terme, welche den Einteilchen-Unterraum mit dem Dreiteilchen-Unterraum verbinden, treten in dem alternativen Generator nicht auf.

Ein Vorteil dieses Generators gegenüber dem Knetter-Uhrig-Generator ist, dass eine aufgrund der Trunkierung mögliche schlechte Beschreibung der Terme, welche den Einteilchen-Unterraum mit dem Dreiteilchen-Unterraum verbinden, sich nicht auf die Beschreibung des Vakuumzustandes auswirkt. Dies kann wie in Abschnitt 6.3.3 deutlich wird zu einem erheblich besseren Konvergenzverhalten der Flussgleichungen führen.

Ein Nachteil des alternativen Generators ist, dass durch die kontinuierliche unitäre Transformation kein effektiver teilchenzahlerhaltender Hamiltonoperator mehr erzielt wird, da die Terme, welche den Einteilchen-Unterraum mit dem Dreiteilchen-Unterraum verbinden, nicht mehr weggedreht werden. Da jedoch alle Wechselwirkungen mit dem Vakuumzustand $h_{0,0}$ weggedreht werden, kann dieser nach der kontinuierlichen Transformation immer noch direkt abgelesen werden.

Bei $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ hat die Verwendung des alternativen Generators jedoch keinen Effekt auf die Ergebnisse. Die dadurch entstehenden Kurven für die trunkierten Flussgleichungen stimmen mit denen aus Abbildung 6.4 überein. Im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ ist dies keine Überraschung, da der Knetter-Uhrig-Generator für $\theta = \frac{\pi}{4}$ und $\lambda = 0$ identisch ist mit dem alternativen Generator. Beide bestehen nur aus Termen, die aus vier Operatoren bestehen, welche entweder alle Teilchenvernichter oder Teilchenerzeuger sind.

Für den Operator $H_{\lambda,U}^b$ liegt es daran, dass die Terme, welche aus ausschließlich zwei Erzeugern oder zwei Vernichtern bestehen, während der gesamten kontinuierlichen unitären Transformation so klein sind, dass sie für den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ keine Rolle spielen. Dies ist für den Fall des Knetter-Uhrig-Generators exemplarisch für $U = 5$ in Abbildung 6.5 dargestellt.

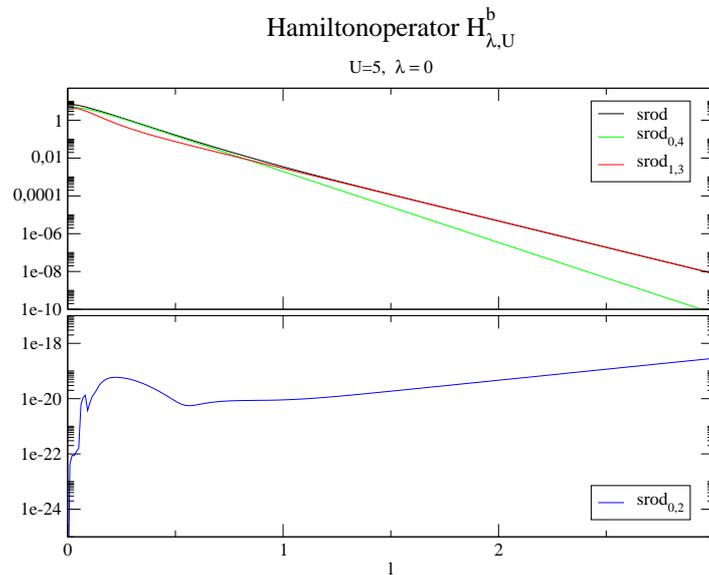


Abbildung 6.5: Zusammensetzung der **srod** im trunkierten Fall für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$. Die Abbildung zeigt den Verlauf der Größen **srod** _{$i-j$} während der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation für die Parameter $\lambda = 0$ und $U = 5$. Der Parameter J wurde dabei gleich 1 gesetzt.

Somit wird der Vakuumerwartungswert erneut nur durch Terme beeinflusst, welche aus vier Erzeugern oder vier Vernichtern bestehen. Daher liefert der alternative Generator für die betrachteten Startparameter auch im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ dieselben Ergebnisse wie der Knetter-Uhrig-Generator.

6.3.3 Ergebnisse im Fall trunkierter Flussgleichungen für beliebige Werte λ und θ für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$

Zuletzt soll in diesem Abschnitt noch für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ untersucht werden, ob es nach der kontinuierlichen unitären Transformation für feste Werte U stationäre Punkte in der $\lambda\theta$ -Ebene existieren. Die Flussgleichung wird dabei wie im vorherigen Abschnitt beschrieben trunkiert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.6 für $U = 3$ und $U = 5$ dargestellt.

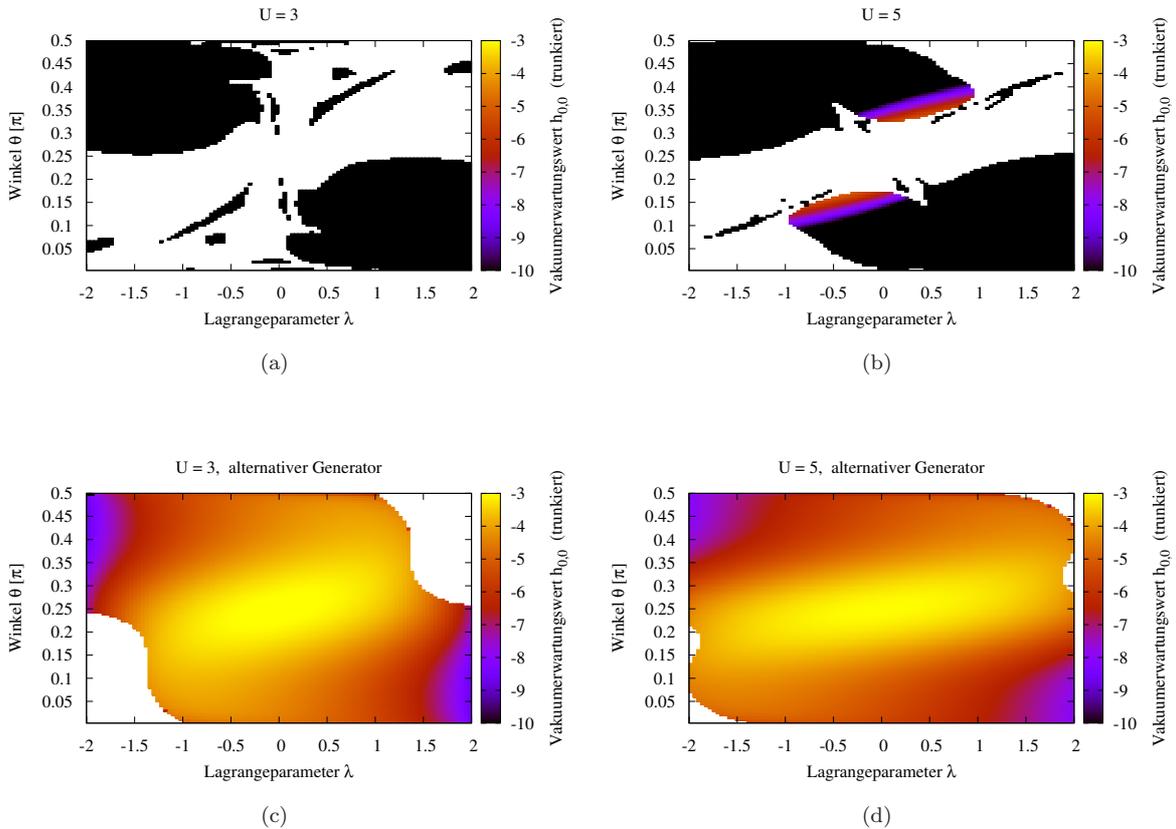


Abbildung 6.6: Abhängigkeit des Vakuumerwartungswerts $h_{0,0}$ von den Parametern λ und θ für $U = 3$ und $U = 5$. Die Abbildungen 6.6(a) und 6.6(b) zeigen den Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ nach der trunkierten kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Parameter λ und θ bei $U = 3$ und $U = 5$ für den Knetter-Uhrig-Generator. Abbildung 6.6(c) und 6.6(d) zeigen die Ergebnisse für $h_{0,0}$ bei derselben Trunkierung für den alternativen Generator. Der Parameter J wurde stets gleich 1 gesetzt und das DGL-System so weit berechnet, bis jeweils $\mathbf{srod} < 10^{-5}$ galt. An weißen Stellen divergiert die Flussgleichung, und an schwarzen Stellen liegt der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ unterhalb von -10 .

Man sieht, dass der Vakuumerwartungswert $h_{0,0}$ für die beiden Werte $U = 3$ und $U = 5$ ein qualitativ ähnliches Verhalten zeigt. In Abbildung 6.6(a) und 6.6(b) wurde jeweils der vollständige Knetter-Uhrig-Generator verwendet. Abbildung 6.6(c) und 6.6(d) zeigen die Ergebnisse für den Vakuumer-

wartungswert $h_{0,0}$ bei Verwendung des alternativen Generators. Sowohl für $U = 3$ als auch für $U = 5$ existiert genau ein lokales Maximum bei dem durch Molekularfeld-Rechnung ermittelten Punkt $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$, welcher schon im vorherigen Abschnitt untersucht wurde.

Verwendet man hingegen den Knetter-Uhrig-Generator, so divergiert die trunkierte Flussgleichung in der Umgebung dieses Punktes¹.

Insgesamt kann somit durch das Abweichen von den durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmten Parametern im Fall des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ keine Verbesserung des Grundzustandserwartungswerts $h_{0,0}$ erzielt werden.

Für den Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^b$ wurden ebenfalls Rechnungen für $U = 3$ und $U = 5$ mit $\lambda \neq 0$ durchgeführt. Auch bei diesen Rechnungen ergaben sich keine Verbesserungen.

Mit der betrachteten Trunkierung sind somit keine sinnvollen Ergebnisse zu erzielen.

6.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurden zunächst Molekularfeld-Rechnungen für das Heisenberg-Quadrat in fermionischer Darstellung durchgeführt. Anschließend wurde versucht, deren Ergebnisse durch kontinuierliche unitäre Transformationen zu verbessern.

Dabei ergaben sich selbst bei einer nicht trunkierten Flussgleichung Konvergenzprobleme, welche durch die Berücksichtigung der Hermitezität des Hamiltonoperators beim Aufstellen der Flussgleichung beseitigt werden konnten. Die explizite Verwendung der Symmetrie in den Koeffizienten der Flussgleichung, welche aufgrund der Hermitezität des Hamiltonoperators vorhanden ist, kann demnach bei der numerischen Integration der Flussgleichung eine entscheidende Rolle spielen.

Danach wurde der Einfluss einer Trunkierung der Flussgleichung auf den Vakuumwartungswert $h_{0,0}$ untersucht. Dabei wurden in der Flussgleichung nur Terme berücksichtigt, die aus maximal vier Operatoren aufgebaut waren oder aus drei Erzeugern und drei Vernichtern bestanden. Diese Trunkierung lieferte gerade in dem vorherigen Kapitel 5 für das Heisenberg-Dimer ein optimales Ergebnis.

Zunächst wurden die durch die Molekularfeld-Rechnungen bestimmten Startwerte untersucht und lediglich der Parameter U variiert. Dies führte zu keinerlei sinnvollen Ergebnissen.

Eine Variation der durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmten Parameter λ und θ für feste Werte U führt im Fall des Knetter-Uhrig-Generators zu Konvergenzproblemen. Die Verwendung eines alternativen Generators, der lediglich die Wechselwirkungen mit dem Vakuum asymptotisch beseitigt, führt auf einen stationären Punkt in der λ - θ -Ebene bei den durch die Molekularfeld-Rechnung bestimmten Parametern $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$. Unter dem Aspekt der Robustheit der Integration ist daher der alternative Generator vorzuziehen.

Insgesamt war es mit der betrachteten Trunkierung nicht möglich, sinnvolle Ergebnisse zu erzielen. Eine Trunkierung, die weniger Terme vernachlässigt, wurde nicht betrachtet, da eine Trunkierung gewählt werden sollte, die es auch noch zulässt, größere Systeme zu behandeln.

¹Der Punkt bei genau $\lambda = 0$ und $\theta = \frac{\pi}{4}$ wurde für Abbildungen 6.6(a) und 6.6(b) nicht berechnet.

7 Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, zu untersuchen, ob es möglich ist mit der Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen Molekularfeld-Rechnungen für antiferromagnetische Heisenberg-Modelle systematisch zu verbessern.

Um die berechneten Ergebnisse leicht qualitativ und quantitativ bewerten zu können, wurden dazu kleine antiferromagnetische Heisenberg-Modelle untersucht, deren exaktes Eigenwertspektrum zugänglich war.

Für die Molekularfeld-Rechnungen wurden die Spinoperatoren zunächst auf eine bosonische bzw. fermionische Algebra abgebildet. Dabei wurde sowohl im bosonischen als auch im fermionischen Fall die Dimension des Hilbertraums vergrößert, so dass nicht mehr alle Zustände physikalisch relevant waren. Der jeweilige physikalisch relevante Unterraum musste daher durch die Verwendung einer Nebenbedingung festgelegt werden.

Um die entsprechende Nebenbedingung bei den durchgeführten Rechnungen zu berücksichtigen wurde neben der üblichen Verwendung eines Lagrangeparameters λ ebenfalls ein Term H_U zum jeweiligen Hamiltonoperator addiert, welcher die Nebenbedingung quadratisch enthielt. Durch das Vergrößern des Parameters U konnten so unphysikalische Zustände energetisch erhöht werden.

Durch die Erweiterung des Hilbertraums stellten die durch die Molekularfeld-Rechnung beschriebenen Einteilchen-Anregungen keine physikalisch relevanten Anregungen dar. Daher sollte durch die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen insbesondere der Zweiteilchen-Unterraum beschrieben werden, um so neben der Beschreibung des Grundzustandes ebenfalls physikalische Anregungen diskutieren zu können.

Die Molekularfeld-Rechnungen wurden so durchgeführt, dass die jeweilige Nebenbedingung für den Vakuumerwartungswert im Mittel erfüllt war. Ausgehend von den Ergebnissen der Molekularfeld-Rechnungen wurden dann kontinuierliche unitäre Transformationen durchgeführt, wobei die bei der Molekularfeld-Näherung vernachlässigten Terme zunächst vollständig berücksichtigt wurden. Näherungen wurden erst beim Aufstellen der Flussgleichungen getätigt.

Als Generator der kontinuierlichen unitären Transformationen wurde hauptsächlich der Knetter-Uhrig-Generator verwendet, wodurch teilchenzahlerhaltende effektive Hamiltonoperatoren erzeugt werden konnten. Näherungen beim Aufstellen der Flussgleichungen wurden durchgeführt, indem zunächst jeder Term des Hamiltonoperators normalgeordnet wurde und anschließend Terme, welche höhere Anregungen beschrieben, vernachlässigt wurden. Aufgrund dieser Trunkierung waren die zuvor durchgeführten Molekularfeld-Rechnungen notwendig, um so einen geeigneten Startpunkt für die kontinuierliche unitäre Transformation zu bestimmen.

Um den Startpunkt der kontinuierlichen unitären Transformation noch zu optimieren, wurde der Vakuumerwartungswert nach der kontinuierlichen unitären Transformation als Funktion der Startparameter λ , U und θ betrachtet. Der letzte Parameter θ beschrieb dabei stets einen Winkel einer Bogoliubov-Transformation, welche zur Diagonalisierung betrachteter Molekularfeld-Hamiltonoperatoren verwendet wurde.

Der Vakuumerwartungswert sollte nach der kontinuierlichen Transformation stationär bezüglich λ sein, um die Nebenbedingung zumindest im Mittel zu erfüllen. Bei einer exakten Rechnung hätte die Wahl des Winkels θ die Ergebnisse nicht beeinflusst. Aufgrund der durchgeführten Trunkierung der Flussgleichungen war dies jedoch nicht mehr der Fall und es konnte ebenfalls maximal Stationarität bezüglich des Winkels θ erzielt werden. Um den Einfluss des Parameters U auf die Ergebnisse zu untersuchen, wurde dieser ebenfalls variiert.

In Kapitel 4 wurde eine bosonische Darstellung des Heisenberg-Dimers untersucht. Dabei zeigte sich, dass die Verwendung eines Terms H_U notwendig ist, um dafür zu sorgen, dass nach der kontinuierlichen unitären Transformation der Vakuumzustand näherungsweise den physikalischen Grundzustand beschreibt. Allein durch die Verwendung eines Lagrangeparameters λ war dies nicht möglich. Gute Ergebnisse konnten jedoch auch durch die Verwendung eines Terms H_U nicht erzielt werden. Insbe-

sondere konnte kein stationärer Punkt für den Vakuumerwartungswert bezüglich λ und θ gefunden werden.

In Kapitel 5 wurde eine fermionische Darstellung des Heisenberg-Dimers betrachtet. Da bei der Darstellung der Spinoperatoren mittels Fermionen der Hilbertraum endlich bleibt, war es möglich, die Flussgleichung vollständig aufzustellen und somit eine kontinuierliche unitäre Transformation ohne Näherungen durchzuführen. Die so erzielten Ergebnisse konnten anschließend mit trunkierten Rechnungen verglichen werden.

Für die fermionische Darstellung des Heisenberg-Dimers war es möglich, eine Trunkierung zu finden, die ein optimales Ergebnis lieferte. Dies wurde ausführlich für den Fall $U = 2$ diskutiert. Es konnte ein stationärer Punkt für den Vakuumerwartungswert bezüglich λ und θ bestimmt werden. An diesem Punkt wurde der physikalische Grundzustand nach der kontinuierlichen unitären Transformation durch den Vakuumzustand beschrieben und die drei weiteren physikalisch relevanten Zustände waren durch gebundene Zustände im Zweiteilchen-Unterraum gegeben. Auch quantitativ stimmten die Ergebnisse mit den exakten Werten des antiferromagnetischen Heisenberg-Dimers überein. Zusätzlich lagen sämtliche unphysikalischen Zustände im Energiespektrum über den physikalischen Zuständen. Allerdings hatte die gewählte Trunkierung gerade an diesem stationären Punkt keinerlei Einfluss auf die Flussgleichung, so dass es sich dort um eine nicht trunkierte Rechnung handelte. Es stellte sich daher die Frage, ob die betrachtete Trunkierung auch in komplexeren Problemen erfolgreich angewendet werden kann.

Daher wurde in Kapitel 6 getestet, ob dieselbe Trunkierung auch bei dem etwas komplexeren System des antiferromagnetischen Heisenberg-Quadrats sinnvolle Ergebnisse liefert. Dies war jedoch nicht der Fall.

Insgesamt zeigte sich, dass der gewählte Zugang zur Beschreibung antiferromagnetischer Heisenberg-Modelle nicht sinnvoll ist. Es konnten zwar bei den nicht trunkierten Rechnungen für die fermionische Darstellung des Heisenberg-Dimers und des Heisenberg-Quadrats die gewünschten Resultate erzielt werden, allerdings führte eine Trunkierung der Flussgleichung dazu, dass die Ergebnissen nicht mehr verwendbar waren.

Bei der Behandlung größerer Systeme kann jedoch selbst bei endlichen Systemen aufgrund des steigenden Rechenaufwands auf eine Trunkierung der Flussgleichung nicht verzichtet werden, so dass es äußerst fragwürdig, wenn nicht sogar unmöglich zu sein scheint, dass die in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen sinnvolle Ergebnisse für größere Systeme liefern können, deren Beschreibung letztendlich das Ziel gewesen wäre.

Interessanter Weise divergierte in Kapitel 6 eine nicht trunkierte Flussgleichung bei der numerischen Integration. Dies lässt sich nur durch numerische Ungenauigkeiten bei der Integration der Flussgleichung erklären, da analytisch gezeigt werden kann, dass in dem betrachteten Fall die Flussgleichung konvergiert. In der Tat konnte durch die explizite Verwendung einer Symmetrie in den Koeffizienten der Flussgleichung, welche aufgrund der Hermitizität des Hamiltonoperators gegeben ist, ein besseres Konvergenzverhalten erzielt werden.

Demnach scheint die Verwendung von Symmetrien bei dem Aufstellen der Flussgleichung eine entscheidende Rolle für die *numerische* Integration der Flussgleichung zu spielen.

A Diagonalisierung bilinearer Hamiltonoperatoren

Ein in der Quantenmechanik von Vielteilchensystemen häufig auftretendes Problem ist die Diagonalisierung bilinearer Hamiltonoperatoren, welche aus Teilchen erzeugenden und Teilchen vernichtenden Operatoren aufgebaut sind. Die Molekularfeld-Näherungen aus den Abschnitten 4.2, 5.2 und 6.2 führen zum Beispiel gerade auf solche bilinearen Hamiltonoperatoren. Im Folgenden wird daher zunächst kurz ein allgemeines Verfahren zur Diagonalisierung beliebiger bilinearer Hamiltonoperatoren mittels kanonischer unitärer Transformationen beschrieben. Danach wird der Spezialfall der Bogoliubov-Transformation sowohl für Bosonen als auch für Fermionen dargestellt. Die in der vorliegenden Arbeit auftretenden Hamiltonoperatoren (4.2.5), (4.2.22), (4.2.34), (5.2.5) und (6.2.9) können durch solche Transformationen diagonalisiert werden. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird noch dargestellt, wie der in Abschnitt 6.2.2 auftretende Hamiltonoperator (6.2.21) diagonalisiert werden kann. Eine ausführliche Darstellung der Themen "Diagonalisierung bilinearer Hamiltonoperatoren und kanonische Transformationen" findet man zum Beispiel im dem Buch [BR86].

A.1 Hermitesche bilineare Formen aus Erzeugern und Vernichtern

Die allgemeine Form eines Hamiltonoperators, der als bilineare Form von Teilchen erzeugenden und Teilchen vernichtenden Operatoren dargestellt werden kann, ist gegeben durch

$$H = \sum_{ij}^n \Lambda_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{ij}^n \left(\Gamma_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger + \overline{\Gamma_{ij}} a_j a_i \right) . \quad (\text{A.1.1})$$

Die Operatoren a_i können sowohl Fermionen als auch Bosonen beschreiben. Sie erfüllen also entweder die Antikommutatorrelation (2.5.5) oder die Kommutatorrelation (2.5.4). Damit der Hamiltonoperator (A.1.1) hermitesch ist, müssen die Matrizen Λ und Γ die folgenden Eigenschaften besitzen

$$\Lambda = \Lambda^\dagger \quad (\text{A.1.2a})$$

$$\Gamma^T = -\epsilon \Gamma \quad (\text{A.1.2b})$$

Im Falle eines fermionischen Systems ist der Parameter ϵ als $\epsilon = 1$ und im Falle eines bosonischen Systems als $\epsilon = -1$ zu wählen. Durch die Definition eines $2n$ dimensionalen Vektors α mit

$$\alpha = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ a_1^\dagger \\ \vdots \\ a_n^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.3})$$

kann der Hamiltonoperator (A.1.1) auch in der Form

$$H = \frac{1}{2} \alpha^\dagger M \alpha + \frac{\epsilon}{2} \text{Sp} \Lambda \quad (\text{A.1.4})$$

notiert werden. Die Matrix M ist dabei gegeben durch

$$M = \begin{pmatrix} \Lambda & \Gamma \\ -\epsilon \overline{\Gamma} & -\epsilon \overline{\Lambda} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.1.5})$$

Ziel ist es nun, eine kanonische Transformation K so zu bestimmen, dass der Hamiltonoperator (A.1.1) bzw. (A.1.4) eine diagonale Gestalt annimmt. Die durch diese kanonische Transformation definierten neuen Operatoren

$$\boldsymbol{\beta} = K\boldsymbol{\alpha} \quad (\text{A.1.6})$$

erzeugen oder vernichten die effektiven Teilchen. Eine Transformation wird im Allgemeinen als kanonisch bezeichnet, sobald sie die jeweiligen Kommutatorrelationen invariant lässt, d.h. es gilt für die neu definierten Operatoren $\boldsymbol{\beta}$ ebenfalls

$$\left[\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\beta}^\dagger \right]_\epsilon = \eta \quad , \quad (\text{A.1.7})$$

wobei die $2n \times 2n$ Matrix η definiert ist durch

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix} \quad . \quad (\text{A.1.8})$$

Unter Verwendung der Kanonizität der Transformation K sowie der Unitärität der zugehörigen Transformation U im Fockraum nimmt der Hamiltonoperator (A.1.4) in der Basis der Operatoren $\boldsymbol{\beta}$ die Form

$$H = \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}^\dagger (\eta K \eta M K^{-1}) \boldsymbol{\beta} + \frac{\epsilon}{2} \text{Sp } \Lambda \quad (\text{A.1.9})$$

an. Ist K nun die Transformation, welche die Matrix ηM diagonalisiert, so kann gezeigt werden, dass die $2n \times 2n$ Matrix Ω die Struktur

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix} \quad \text{mit } \omega = \text{diag}(\omega_1, \dots, \omega_n) \quad (\text{A.1.10})$$

annimmt [BR86]. Mit dem n dimensionalen Vektor

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.11})$$

erhält man letztendlich den Hamiltonoperator

$$H = \mathbf{b}^\dagger \omega \mathbf{b} - \frac{\epsilon}{2} \text{Sp } \omega + \frac{\epsilon}{2} \text{Sp } \Lambda \quad , \quad (\text{A.1.12})$$

der keine Wechselwirkungen zwischen den effektiven Teilchen besitzt. Für einen solchen freien Hamiltonoperator sind sowohl das gesamte Eigenwertspektrum als auch sämtliche Eigenzustände bekannt [Sch05, BR86].

Um einen bilinearen bosonischen oder fermionischen Hamiltonoperator der Gestalt (A.1.1) bzw. (A.1.4) auf einen freien Hamiltonoperator der Form (A.1.12) zu überführen, muss also die Matrix ηM diagonalisiert werden. Im fermionischen Fall ist $\eta = \mathbb{1}$ und man muss somit die hermitesche Matrix M diagonalisieren. Betrachtet man jedoch Bosonen, so hat man die im Allgemeinen nicht hermitesche Matrix ηM zu diagonalisieren. Ebenfalls existieren Unterschiede in der Struktur der kanonischen Transformation K . Für Fermionen sind die möglichen Transformationen isomorph zur reellen orthogonalen Gruppe $O(2n)$. Im Gegensatz dazu gilt für Bosonen, dass die Transformationen isomorph zur reellen symplektischen Gruppe $Sp(2n)$ sind.

A.2 Diagonalisierung spezieller bilinearer Hamiltonoperatoren

Nachdem im vorigen Abschnitt die Diagonalisierung bilinearer Hamiltonoperatoren allgemein dargestellt wurde, sollen nun die Spezialfälle untersucht werden, welche in der vorliegenden Arbeit verwendet werden. Zunächst wird die bosonische Bogoliubov-Transformation vorgestellt, welche in den Abschnitten 4.2.1, 4.2.2 und 4.2.3 verwendet wird, um die dort auftretenden Hamiltonoperatoren zu diagonalisieren. Danach wird die fermionische Variante der Bogoliubov-Transformation beschrieben, die in Abschnitt 5.2 und 6.2.1 Anwendung findet. Zuletzt wird die kanonische Transformation diskutiert, mit der der Hamiltonoperator (6.2.21) aus Abschnitt 6.2.2 diagonalisiert wird.

A.2.1 Bosonische Bogoliubov-Transformation

Gegeben sei ein Hamiltonoperator der Form

$$H = \Lambda \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 \right) + \Gamma a_1^\dagger a_2^\dagger + \bar{\Gamma} a_1 a_2 \quad (\text{A.2.1})$$

mit den bosonischen Operatoren a_1 und a_2 . Um diesen Hamiltonoperator zu diagonalisieren, muss gemäß Abschnitt A.1 eine kanonische Transformation K bestimmt werden, welche die Matrix

$$\eta M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & \Lambda & \Gamma & 0 \\ 0 & \bar{\Gamma} & \Lambda & 0 \\ \bar{\Gamma} & 0 & 0 & \Lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & \Lambda & \Gamma & 0 \\ 0 & -\bar{\Gamma} & -\Lambda & 0 \\ -\bar{\Gamma} & 0 & 0 & -\Lambda \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.2})$$

diagonalisiert. Die kanonische Transformation K , welche dies leistet, wird als bosonische Bogoliubov-Transformation bezeichnet und ist gegeben durch

$$\beta = K\alpha = \begin{pmatrix} \cosh \theta & 0 & 0 & -e^{i\varphi} \sinh \theta \\ 0 & \cosh \theta & -e^{i\varphi} \sinh \theta & 0 \\ 0 & -e^{-i\varphi} \sinh \theta & \cosh \theta & 0 \\ -e^{-i\varphi} \sinh \theta & 0 & 0 & \cosh \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_1^\dagger \\ a_2^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2.3})$$

Der Hamiltonoperator (A.2.1) nimmt dadurch die Form

$$\begin{aligned} H = & (\Lambda \cosh 2\theta + \Re(\Gamma e^{-i\varphi}) \sinh 2\theta) (b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2) \\ & + (\Lambda \sinh 2\theta + \Gamma e^{-i\varphi} \cosh^2 \theta + \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \sinh^2 \theta) e^{i\varphi} b_1^\dagger b_2^\dagger \\ & + (\Lambda \sinh 2\theta + \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \cosh^2 \theta + \Gamma e^{-i\varphi} \sinh^2 \theta) e^{-i\varphi} b_1 b_2 \\ & + 2\Lambda \sinh^2 \theta - \Re(\Gamma e^{-i\varphi}) \sinh 2\theta \end{aligned} \quad (\text{A.2.4})$$

an. Damit die Faktoren vor den nicht diagonalen Termen $b_1^\dagger b_2^\dagger$ und $b_1 b_2$ verschwinden, müssen die Winkel θ und φ so gewählt werden, dass

$$\Gamma e^{-i\varphi} = \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2.5a})$$

und

$$\Lambda \sinh 2\theta + \Gamma e^{-i\varphi} \cosh 2\theta = 0 \quad (\text{A.2.5b})$$

gilt. Unter Verwendung der Eigenschaften der Hyperbelfunktionen (für $x > 0$)

$$\cosh x = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 x}} \quad (\text{A.2.6a})$$

und

$$\sinh x = \frac{\tanh x}{\sqrt{1 - \tanh^2 x}}, \quad (\text{A.2.6b})$$

sowie der Bedingungen (A.2.5) erhält man letztendlich (für $\Lambda \neq 0$) den diagonalen Hamiltonoperator

$$\boxed{H = \sqrt{\Lambda^2 - (\Gamma e^{-i\varphi})^2} (b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 + 1) - \Lambda} \quad (\text{A.2.7})$$

A.2.2 Fermionische Bogoliubov-Transformation

Man betrachte einen Hamiltonoperator der Form

$$H = \Lambda (c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} + c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow}) + \Gamma c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\downarrow}^{\dagger} - \bar{\Gamma} c_{\uparrow} c_{\downarrow} \quad (\text{A.2.8})$$

mit den fermionischen Operatoren c_{\uparrow} und c_{\downarrow} . In diesem Fall muss gemäß Abschnitt A.1 die hermitesche Matrix

$$M = \begin{pmatrix} \Lambda & 0 & 0 & \Gamma \\ 0 & \Lambda & -\Gamma & 0 \\ 0 & -\bar{\Gamma} & -\Lambda & 0 \\ \bar{\Gamma} & 0 & 0 & -\Lambda \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.9})$$

diagonalisiert werden. Dies erreicht man durch die Verwendung der kanonischen fermionischen Bogoliubov-Transformation K , die gegeben ist durch

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\uparrow} \\ \gamma_{\downarrow} \\ \gamma_{\uparrow}^{\dagger} \\ \gamma_{\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & 0 & e^{i\varphi} \sin \theta \\ 0 & \cos \theta & -e^{i\varphi} \sin \theta & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ -e^{-i\varphi} \sin \theta & 0 & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \\ c_{\uparrow}^{\dagger} \\ c_{\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} . \quad (\text{A.2.10})$$

Durch Einsetzen dieser Transformation in den Hamiltonoperator (A.2.8) erhält man

$$\begin{aligned} H = & (\Lambda \cos 2\theta + \Re(\Gamma e^{-i\varphi}) \sin 2\theta) (\gamma_{\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\uparrow} + \gamma_{\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\downarrow}) \\ & - (\Lambda \sin 2\theta - \Gamma e^{-i\varphi} \cos^2 \theta + \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \sin^2 \theta) e^{i\varphi} \gamma_{\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\downarrow}^{\dagger} \\ & + (\Lambda \sin 2\theta - \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \cos^2 \theta + \Gamma e^{-i\varphi} \sin^2 \theta) e^{-i\varphi} \gamma_{\uparrow} \gamma_{\downarrow} \\ & + 2\Lambda \sin^2 \theta - \Re(\Gamma e^{-i\varphi}) \sin 2\theta \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.2.11})$$

Wählt man die Winkel θ und φ so, dass

$$\Gamma e^{-i\varphi} = \bar{\Gamma} e^{i\varphi} \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2.12a})$$

und

$$\Lambda \sin 2\theta - \Gamma e^{-i\varphi} \cos 2\theta = 0 \quad (\text{A.2.12b})$$

gilt, so verschwinden die Faktoren vor den nicht diagonalen Termen $\gamma_{\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\downarrow}^{\dagger}$ und $\gamma_{\uparrow} \gamma_{\downarrow}$. Für die auftretenden trigonometrischen Funktionen gelten im Intervall $0 < x < \frac{\pi}{2}$ die Beziehungen

$$\cos x = \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 x}} \quad (\text{A.2.13a})$$

und

$$\sinh x = \frac{\tan x}{\sqrt{1 + \tan^2 x}} \quad . \quad (\text{A.2.13b})$$

Zusammen mit den Bedingungen (A.2.12) gelangt man schließlich (für $\Lambda \neq 0$) zu einem diagonalen Hamiltonoperator der Form

$$\boxed{H = \sqrt{\Lambda^2 + (\Gamma e^{-i\varphi})^2} (\gamma_{\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\uparrow} + \gamma_{\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\downarrow} - 1) + \Lambda} \quad . \quad (\text{A.2.14})$$

A.2.3 Weitere kanonische Transformation eines fermionischen Hamiltonoperators

Im Allgemeinen ist für den fermionischen Fall ($\epsilon = 1$) die Matrix M (A.1.5) gegeben durch

$$M = \begin{pmatrix} \Lambda & \Gamma \\ -\bar{\Gamma} & -\bar{\Lambda} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.15})$$

mit

$$\Lambda = \Lambda^\dagger \quad \text{und} \quad \Gamma^T = -\Gamma \quad . \quad (\text{A.2.16})$$

Sie erfüllt die Gleichung

$$\eta M \eta = -\bar{M} = -M^T \quad . \quad (\text{A.2.17})$$

Aufgrund der Hermizität von M und der Eigenschaft (A.2.17) folgt für die Matrix M , dass zu einem Eigenvektor mit Eigenwert ω_n immer auch ein Eigenvektor mit Eigenwert $-\omega_n$ existiert. Der Hamiltonoperator (A.1.4) kann durch die Transformation

$$\mathbf{b} = \tilde{K} \boldsymbol{\alpha} \quad (\text{A.2.18})$$

diagonalisiert werden [BR86]. Die $n \times 2n$ Matrix \tilde{K} ist dabei gegeben durch

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1^\dagger \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^\dagger \end{pmatrix} \quad , \quad (\text{A.2.19})$$

wobei mit \mathbf{v}_i der i -te normierte Eigenvektor der Matrix M mit positivem Eigenwert ω_i bezeichnet wird. O.B.d.A seien die Eigenvektoren \mathbf{v}_i orthogonal. Für die durch (A.2.18) definierten Operatoren \mathbf{b} gelten die fermionischen Kommutatorrelationen

$$[b_i, b_j^\dagger]_+ = \mathbf{v}_i^\dagger [\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}^\dagger]_+ \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_j = \delta_{ij} \quad (\text{A.2.20a})$$

$$[b_i, b_j]_+ = [b_i^\dagger, b_j^\dagger]_+ = 0 \quad . \quad (\text{A.2.20b})$$

Die durchgeführte Transformation ist demnach kanonisch. Der in den Operatoren \mathbf{b} formulierte resultierende diagonale Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = \sum_{i=1}^n \omega_i b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \text{Sp} \Lambda - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \omega_i \quad \text{mit} \quad \omega_i > 0 \quad . \quad (\text{A.2.21})$$

Mit dem beschriebenen Verfahren soll nun der in Abschnitt 6.2.2 auftretende Hamiltonoperator (6.2.21) diagonalisiert werden. Dieser Hamiltonoperator (6.2.21) kann in Matrixform geschrieben werden als

$$H_0^{\text{MF}} = \frac{1}{2} \mathbf{c}_1^\dagger M_1 \mathbf{c}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{c}_2^\dagger M_2 \mathbf{c}_2 + \Omega \quad . \quad (\text{A.2.22})$$

Die Vektoren \mathbf{c}_1^\dagger und \mathbf{c}_2^\dagger bestehen dabei aus fermionischen Operatoren $c_{i,\sigma}$ und sind gegeben durch

$$\mathbf{c}_1^\dagger = (c_{1\uparrow}^\dagger, c_{2\downarrow}^\dagger, c_{3\uparrow}^\dagger, c_{4\downarrow}^\dagger, c_{1\uparrow}, c_{2\downarrow}, c_{3\uparrow}, c_{4\downarrow}) \quad (\text{A.2.23a})$$

$$\mathbf{c}_2^\dagger = (c_{1\downarrow}^\dagger, c_{2\uparrow}^\dagger, c_{3\downarrow}^\dagger, c_{4\uparrow}^\dagger, c_{1\downarrow}, c_{2\uparrow}, c_{3\downarrow}, c_{4\uparrow}) \quad . \quad (\text{A.2.23b})$$

Die Matrizen M_1 und M_2 des Hamiltonoperators (6.2.21) besitzen die Form

$$M_{1/2} = \begin{pmatrix} 0 & \Gamma_{1/2} \\ -\bar{\Gamma}_{1/2} & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad (\text{A.2.24})$$

wobei die 4×4 Matrizen Γ_1 und Γ_2 durch

$$\Gamma_1 = \Gamma \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -i \\ -1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -1 \\ i & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.25a})$$

und

$$\Gamma_2 = \Gamma \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & i \\ 1 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 1 \\ -i & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } \Gamma \in \mathbb{C} \quad (\text{A.2.25b})$$

gegeben sind. Der Summand Ω in (A.2.22) ist eine für die Diagonalisierung unerhebliche Konstante. Um die kanonischen Transformationen \tilde{K}_1 und \tilde{K}_2 zu bestimmen, welche den Hamiltonoperator (A.2.22) diagonalisieren, müssen gemäß (A.2.19) sämtliche Eigenvektoren mit positiven Eigenwerten der Matrizen M_1 und M_2 bestimmt werden. Diese wurden mit Hilfe von MATHEMATICA 4.1 berechnet, wodurch sich die neuen fermionischen Operatoren durch

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1\uparrow} \\ \gamma_{2\downarrow} \\ \gamma_{3\uparrow} \\ \gamma_{4\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\uparrow} \\ c_{2\downarrow} \\ c_{3\uparrow} \\ c_{4\downarrow} \\ c_{1\uparrow}^\dagger \\ c_{2\downarrow}^\dagger \\ c_{3\uparrow}^\dagger \\ c_{4\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.26a})$$

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1\downarrow} \\ \gamma_{2\uparrow} \\ \gamma_{3\downarrow} \\ \gamma_{4\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{i}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\downarrow} \\ c_{2\uparrow} \\ c_{3\downarrow} \\ c_{4\uparrow} \\ c_{1\downarrow}^\dagger \\ c_{2\uparrow}^\dagger \\ c_{3\downarrow}^\dagger \\ c_{4\uparrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.26b})$$

ergeben. Die jeweiligen adjungierten Operatoren erhält man durch Adjungieren der Gleichungen (A.2.26). Sämtliche positiven Eigenwerte sind gleich $\sqrt{2}\Gamma$, so dass nach Gleichung (A.2.21) der diagonalisierte Hamiltonoperator die Form

$$H = \sum_{i=1}^4 \sqrt{2}\Gamma \left(\gamma_{i\uparrow}^\dagger \gamma_{i\uparrow} + \gamma_{i\downarrow}^\dagger \gamma_{i\downarrow} \right) - 2\sqrt{2}\Gamma + \Omega \quad (\text{A.2.27})$$

besitzt.

B Erhaltung der z -Komponente des Gesamtspins im Verlauf der kontinuierlichen unitären Transformation

In diesem Anhang wird gezeigt, dass die z -Komponente des Gesamtspins $S_{z,\text{ges}}$ während der in Abschnitt 4.3, 5.3 und 6.3 durchgeführten kontinuierlichen unitären Transformationen erhalten bleibt. Dies folgt aus der Struktur des verwendeten Knetter-Uhrig-Generators und der teilchenzahlerhaltenden Struktur des Operators $S_{z,\text{ges}}$.

Alle betrachteten Hamiltonoperatoren können geschrieben werden als

$$H = H^0 + H^+ + H^- \quad , \quad (\text{B.0.1})$$

wobei der Operator H^0 alle Terme beinhaltet, welche die Teilchenzahl nicht verändern, und der Operator H^+ (H^-) nur aus Termen besteht, welche die Teilchenzahl erhöhen (verringern) (vgl. Abschnitt 2.5.3). Der Knetter-Uhrig-Generator ist gegeben durch

$$\eta = H^+ - H^- \quad . \quad (\text{B.0.2})$$

Für den Startpunkt bei $l = 0$ ist $S_{z,\text{ges}}$ eine Erhaltungsgröße

$$\begin{aligned} [H, S_{z,\text{ges}}] &= [H^0 + H^+ + H^-, S_{z,\text{ges}}] \\ &= [H^0, S_{z,\text{ges}}] + [H^+, S_{z,\text{ges}}] + [H^-, S_{z,\text{ges}}] \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.0.3})$$

Da die z -Komponente des Gesamtspins teilchenzahlerhaltend ist, folgt aus B.0.3

$$[H^0, S_{z,\text{ges}}] = 0 \quad (\text{B.0.4a})$$

$$[H^+, S_{z,\text{ges}}] = 0 \quad (\text{B.0.4b})$$

$$[H^-, S_{z,\text{ges}}] = 0 \quad . \quad (\text{B.0.4c})$$

Somit gilt gemäß Gleichung (2.1.9)

$$\begin{aligned} \partial_l S_{z,\text{ges}} &= [\eta, S_{z,\text{ges}}] \\ &= [H^+, S_{z,\text{ges}}] - [H^-, S_{z,\text{ges}}] \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.0.5})$$

Demnach wird die z -Komponente des Gesamtspins $S_{z,\text{ges}}$ während der gesamten kontinuierlichen unitären Transformation nicht geändert.

C Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$

In diesem Abschnitt sind die Hamiltonoperatoren $H_{\lambda,U}^a$ und $H_{\lambda,U}^b$ aus Kapitel 6 aufgeführt. Es sind nur die Terme dargestellt, welche direkt aus der Transformation a) (6.3.2) bzw. der Transformation b) (6.3.3) entstehen. Terme, die erst im Laufe der kontinuierlichen unitären Transformation entstehen, sind nicht aufgeführt.

Durch entsprechende Wahl der Parameter θ , λ und U sowie der Vernachlässigung sämtlicher Terme, welche aus vier Operatoren bestehen, ergeben sich die in Abschnitt 6.2 bestimmten Molekularfeld-Hamiltonoperatoren.

C.1 Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$

Der Hamiltonoperator $H_{\lambda,U}^a$ ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}
H_{\lambda,U}^a = & h_{0,0} \\
& + h_{1,1} \left(\sum_{i=1}^4 \gamma_{i\uparrow}^\dagger \gamma_{i\uparrow} + \gamma_{i\downarrow}^\dagger \gamma_{i\downarrow} \right) \\
& + h_{0,2} \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^a \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) \\
& + h_{2,2}^b \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} \right) \\
& + h_{2,2}^c \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right) \\
& + h_{2,2}^d \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) \\
& + h_{1,3} \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \right. \\
& \quad \left. + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{0,4}^a \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} + \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^e \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^f \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^g \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^h \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\downarrow} \right) \\
& + h_{2,2}^i \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right) \\
& + h_{2,2}^j \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{2,2}^k \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \right) \\
& + h_{2,2}^l \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \right) \\
& + h_{1,3}^b \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right. \\
& \quad - \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \\
& \quad + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \\
& \quad \left. - \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{1,3}^c \left(\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} \right. \\
& \quad \left. + \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} - \gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right) \\
& + h_{0,4}^b \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \text{h.c.} \right) \\
& + h_{0,4}^c \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \text{h.c.} \right)
\end{aligned}$$

Durch Vernachlässigen aller Koeffizienten ab $h_{2,2}^e$ würde sich der Hamiltonoperator zweier unabhängiger nicht wechselwirkender Heisenberg-Dimere ergeben.

Die Startwerte des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^a$ sind gegeben durch:

$$\begin{aligned}
h_{0,0}(0) &= J \left(\frac{3}{8} (\cos 4\theta - 1) \right) + U (\cos 4\theta + 3) + \lambda (-4 \cos 2\theta) \\
h_{1,1}(0) &= J \left(-\frac{3}{16} (\cos 4\theta - 1) \right) + U \left(-\frac{1}{2} (\cos 4\theta + 1) \right) + \lambda (\cos 2\theta) \\
h_{0,2}(0) &= J \left(-\frac{3}{16} \sin 4\theta \right) + U \left(-\frac{1}{2} \sin 4\theta \right) + \lambda (\sin 2\theta) \\
h_{2,2}^a(0) &= J \left(-\frac{3}{16} (\cos 4\theta - 1) \right) + U \left(-\frac{1}{2} (\cos 4\theta + 3) \right) \\
h_{2,2}^b(0) &= J \left(-\frac{1}{16} (3 \cos 4\theta + 1) \right) + U \left(\frac{1}{2} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^c(0) &= J \left(\frac{1}{4} \right) \\
h_{2,2}^d(0) &= J \left(-\frac{1}{16} (3 \cos 4\theta + 5) \right) + U \left(\frac{1}{2} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^e(0) &= J \left(\frac{1}{8} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^f(0) &= J \left(-\frac{1}{8} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^g(0) &= J \left(\frac{1}{16} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^h(0) &= J \left(-\frac{1}{16} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^i(0) &= J \left(\frac{1}{16} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{2,2}^j(0) &= J \left(-\frac{1}{8} (\cos 4\theta + 3) \right) \\
h_{2,2}^k(0) &= J \left(-\frac{1}{16} (\cos 4\theta + 3) \right) \\
h_{2,2}^l(0) &= J \left(\frac{1}{16} (\cos 4\theta + 3) \right) \\
h_{1,3}^a(0) &= J \left(-\frac{3}{16} \sin 4\theta \right) + U \left(-\frac{1}{2} \sin 4\theta \right) \\
h_{1,3}^b(0) &= J \left(-\frac{1}{8} \sin 4\theta \right) \\
h_{1,3}^c(0) &= J \left(\frac{1}{4} \sin 4\theta \right) \\
h_{0,4}^a(0) &= J \left(\frac{3}{16} (\cos 4\theta - 1) \right) + U \left(-\frac{1}{2} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{0,4}^b(0) &= J \left(\frac{1}{8} (1 - \cos 4\theta) \right) \\
h_{0,4}^c(0) &= J \left(-\frac{1}{16} (1 - \cos 4\theta) \right)
\end{aligned}$$

Wählt man $\theta = \frac{\pi}{4}$ und $\lambda = 0$, so sind alle Koeffizienten $h_{i,j}$ mit $j - i = 2$ gleich null.

$$\begin{aligned}
 & + h_{1,3}^c \left(\gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} - i\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + i\gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right. \\
 & \quad \left. - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + i\gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - i\gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{1,3}^d \left(\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - i\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} - \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + i\gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right. \\
 & \quad \left. - \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + i\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - i\gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{1,3}^e \left(\gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} - i\gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + i\gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right. \\
 & \quad \left. - \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} + i\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - i\gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{1,3}^f \left(\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - i\gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} - \gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + i\gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} \right. \\
 & \quad \left. - \gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + i\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} + \gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - i\gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{1,3}^g \left(\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} - i\gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + i\gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right. \\
 & \quad \left. + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} - i\gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} - \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + i\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{1,3}^h \left(\gamma_{1\downarrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - i\gamma_{2\downarrow}^\dagger \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{3\downarrow}^\dagger \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + i\gamma_{4\downarrow}^\dagger \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right. \\
 & \quad \left. + \gamma_{1\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - i\gamma_{2\uparrow}^\dagger \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{3\uparrow}^\dagger \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + i\gamma_{4\uparrow}^\dagger \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{0,4}^a \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} - \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} + \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{0,4}^b \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} - \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} - \gamma_{1\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{0,4}^c \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} - \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} - \gamma_{1\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} \gamma_{4\downarrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{0,4}^d \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\uparrow} + \gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right) + \text{h.c.} \\
 & + h_{0,4}^e \left(\gamma_{1\uparrow} \gamma_{2\downarrow} \gamma_{3\uparrow} \gamma_{4\downarrow} + \gamma_{1\downarrow} \gamma_{2\uparrow} \gamma_{3\downarrow} \gamma_{4\uparrow} \right) + \text{h.c.}
 \end{aligned}$$

Die Startwerte des Hamiltonoperators $H_{\lambda,U}^b$ sind gegeben durch:

$$\begin{aligned}
 h_{0,0}(0) &= J \left(-\frac{3}{4} \right) + 2U \\
 h_{1,1}(0) &= J \left(\frac{3}{8} \right) \\
 h_{0,2}(0) &= \lambda \left(\frac{1}{2} \right) \\
 h_{2,2}^a(0) &= J \left(-\frac{1}{8} \right) \\
 h_{2,2}^b(0) &= J \left(-\frac{1}{16} \right) \\
 h_{2,2}^c(0) &= J \left(-\frac{1}{16} \right) \\
 h_{2,2}^d(0) &= J \left(i\frac{1}{16} \right) + U \left(i\frac{1}{4} \right) \\
 h_{2,2}^e(0) &= J \left(-\frac{3}{16} \right) + U \left(\frac{1}{2} \right) \\
 h_{2,2}^f(0) &= J \left(-\frac{1}{4} \right) + U \left(\frac{1}{4} \right)
 \end{aligned}$$

$$h_{2,2}^g(0) = J \left(i\frac{1}{8} \right) + U \left(i\frac{1}{4} \right)$$

$$h_{2,2}^h(0) = J \left(i\frac{1}{16} \right)$$

$$h_{2,2}^i(0) = J \left(\frac{3}{8} \right) + U \left(-\frac{3}{4} \right)$$

$$h_{2,2}^j(0) = J \left(\frac{3}{16} \right)$$

$$h_{2,2}^k(0) = J \left(-\frac{1}{8} \right)$$

$$h_{2,2}^l(0) = J \left(\frac{1}{8} \right) + U \left(-\frac{1}{4} \right)$$

$$h_{2,2}^m(0) = U \left(\frac{1}{4} \right)$$

$$h_{2,2}^n(0) = U \left(\frac{1}{2} \right)$$

$$h_{1,3}^a(0) = U \left(-i\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^b(0) = U \left(-\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^c(0) = U \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^d(0) = U \left(-\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^e(0) = U \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^f(0) = U \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^g(0) = U \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{1,3}^h(0) = U \left(i\frac{1}{4\sqrt{2}} \right)$$

$$h_{0,4}^a(0) = J \left(-\frac{3}{16} \right) + U \left(-\frac{1}{2} \right)$$

$$h_{0,4}^b(0) = J \left(-i\frac{3}{16} \right) + U \left(-i\frac{1}{4} \right)$$

$$h_{0,4}^c(0) = J \left(i\frac{3}{16} \right) + U \left(i\frac{1}{4} \right)$$

$$h_{0,4}^d(0) = J \left(-\frac{1}{16} \right)$$

$$h_{0,4}^e(0) = J \left(\frac{1}{8} \right)$$

D Implementierung von Fermionen und Bosonen in Mathematica

Nicht kommutative Größen können mit MATHEMATICA durch die Verwendung des Paketes NCALGEBRA behandelt werden [nca].

Standardmäßig behandelt dieses Paket alle kleingeschriebenen Variablen a, b, c, \dots als nicht kommutative Größen und alle großgeschriebenen Variablen A, B, C, \dots als kommutative Größen. Die Multiplikation wird durch das Symbol `**` beschrieben. Demnach gelten zum Beispiel die folgenden drei Beziehungen

$$A ** B - B ** A = 0 \quad (D.0.1)$$

$$a ** b - b ** a = a ** b - b ** a \quad (D.0.2)$$

$$A ** b - b ** A = 0 \quad (D.0.3)$$

Der wichtigste Befehl zur Implementierung von Kommutatorregeln ist `Substitute[op_, rules]`, mit dessen Hilfe in `op` vorkommende Größen gemäß der Regel(n) `rules` ersetzt werden können.

In Abbildung D.1 ist die Implementierung eines bosonischen (`Eps=-1`) bzw. fermionischen (`Eps=1`) Kommutators dargestellt.

```
rules = {a ** c -> -Eps ** c ** a + 1}

Commute[op_] := NCExpand[Substitute[op_, rule]]
```

Abbildung D.1: Implementierung eines bosonischen (`Eps=-1`) bzw. fermionischen (`Eps=1`) Kommutators mit Hilfe von MATHEMATICA.

Der Erzeuger wird dabei durch die Variable `c` und der Vernichter durch die Variable `a` repräsentiert. Mit dem Befehl `NCExpand` können nicht kommutierende Größen ausmultipliziert werden.

Um zum Beispiel einen Hamiltonoperator `h`, welcher aus den Operatoren `a` und `c` aufgebaut ist, normal zu ordnen, muss die in Abbildung D.1 definierte Funktion `Commute[op_]` solange angewendet werden, bis keine Veränderung mehr auftritt. Dies kann zum Beispiel durch eine `While`-Schleife wie folgt implementiert werden

```
bool = True;
While[bool, temp = h; h = Commute[h]; If[temp == h, bool = false]] . \quad (D.0.4)
```

Um mehrere Sorten von Bosonen bzw. Fermionen zu behandeln, müssen lediglich die Regeln `rules` geändert werden. Dies ist für den Fall von zwei Bosonen bzw. zwei Fermionen in Abbildung D.2 dargestellt.

```
rules = {a[1] ** c[1] -> -Eps ** c[1] ** a[1] + 1,  
        a[2] ** c[2] -> -Eps ** c[2] ** a[2] + 1,  
        a[2] ** a[1] -> -Eps ** a[1] ** a[2],  
        c[2] ** c[1] -> -Eps ** c[1] ** c[2],  
        a[2] ** c[1] -> -Eps ** c[1] ** a[2],  
        c[2] ** a[1] -> -Eps ** a[1] ** c[2]}
```

Abbildung D.2: Implementierung der Kommutatorregeln für zwei Sorten Bosonen (Eps=-1) oder zwei Sorten Fermionen (Eps=1).

Literaturverzeichnis

- [AA88] D. P. Arovas and A. Auerbach. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models. *Physical Review B*, 38(1):316–333, 1988.
- [Abr65] A. A. Abrikosov. Electron scattering on magnetic impurities in metals and anomalous resistivity effects. *Physics*, 2(1):5–20, 1965.
- [AM88] I. Affleck and J. B. Marston. Large- n limit of the Heisenberg-Hubbard model: Implications for high- T_c superconductors. *Physical Review B*, 37(7):3774–3777, 1988.
- [And51] P. W. Anderson. Limits on the Energy of the Antiferromagnetic Ground State. *Physical Review*, 83(6):1260, 1951.
- [And59] P. W. Anderson. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions. *Physical Review*, 115(1):2, 1959.
- [And87] P. W. Anderson. The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity. *Science*, 235(4793):1196–1198, 1987.
- [Aue94] A. Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer, New York, 1994.
- [BCS57] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Physical Review*, 108:1175–1204, 1957.
- [Bet31] H. Bethe. Zur Theorie der Metalle: I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 71(3-4):205–226, 1931.
- [BM86] J. G. Bednorz and K. A. Müller. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64(2):189–193, 1986.
- [BR86] J.-P. Blaizot and G. Ripka. *Quantum Theory of Finite Systems*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1986.
- [cut] <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~statphys/floweq.html>.
- [DU04] S. Dusuel and G. Uhrig. The quartic oscillator: a non-perturbative study by continuous unitary transformations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(39):9275–9294, 2004.
- [Eme87] V. J. Emery. Theory of high- T_c superconductivity in oxides. *Physical Review Letters*, 58(26):2794–2797, 1987.
- [GW93] S. D. Glazek and K. G. Wilson. Renormalization of Hamiltonians. *Physical Review D*, 48:5863–5872, 1993.
- [GW94] S. D. Glazek and K. G. Wilson. Perturbative renormalization group for Hamiltonians. *Physical Review D*, 49:4214–4218, 1994.
- [HL67] A. B. Harris and R. V. Lange. Single-Particle Excitations in Narrow Energy Bands. *Physical Review*, 157(2):295–314, 1967.
- [HU02] C. P. Heidbrink and G. S. Uhrig. Renormalization by continuous unitary transformations: one-dimensional spinless fermions. *The European Physical Journal B*, 30:443–459, 2002.

- [KBSE98] M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. Endoh. Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides. *Review of Modern Physics*, 70(3):897–928, 1998.
- [Keh06] S. Kehrein. *The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems*. Springer, Berlin, 2006.
- [KM94] S. K. Kehrein and A. Mielke. Flow equations for the Anderson Hamiltonian. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 27:4259–4279, 1994. corrigendum 27:5705, 1994.
- [KM96a] S. K. Kehrein and A. Mielke. On the spin-boson model with a sub-ohmic bath. *Physics Letters A*, 219:313–318, 1996.
- [KM96b] S. K. Kehrein and A. Mielke. Theory of the Anderson Impurity Model: The Schrieffer–Wolff Transformation Reexamined. *Annals of Physics*, 252:1–32, 1996.
- [KM97] S. K. Kehrein and A. Mielke. Low temperature equilibrium correlation functions in dissipative quantum systems. *Annalen der Physik*, 509:90–135, 1997.
- [KMN96] S. K. Kehrein, A. Mielke, and P. Neu. Flow equations for the spin-boson problem. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 99(2):269–280, 1996.
- [KSU03a] C. Knetter, K. P. Schmidt, and G. Uhrig. High order perturbation theory for spectral densities of multi-particle excitations: $S = \frac{1}{2}$ two-leg Heisenberg ladder. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 36(4):525–544, 2003.
- [KSU03b] C. Knetter, K. P. Schmidt, and G. S. Uhrig. The structure of operators in effective particle-conserving models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36:7889–7907, 2003.
- [KU00] C. Knetter and G. S. Uhrig. Perturbation Theory by Flow Equations: Dimerized and Frustrated $S=1/2$ Chain. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 13(2):209–225, 2000.
- [Kub52] R. Kubo. The Spin-Wave Theory of Antiferromagnetics. *Physical Review*, 87(4):568–580, 1952.
- [LW96] P. Lenz and F. Wegner. Flow equations for electron-phonon interactions. *Nuclear Physics B*, 482:693–712, 1996.
- [Man91] E. Manousakis. The spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides. *Reviews of Modern Physics*, 63(1):1–62, 1991.
- [Mie98] A. Mielke. Flow equations for band-matrices. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 5(3):605–611, 1998.
- [nca] <http://math.ucsd.edu/~ncalg/>.
- [Nol06] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer, Heidelberg, 2006.
- [NRTA⁺93] M. Nunez–Regueiro, J. L. Tholence, E. V. Antipov, J. J. Capponi, and M. Marezio. Pressure-Induced Enhancement of T_c Above 150K in Hg-1223. *Science*, 262(5130):97–99, 1993.
- [Ogu60] T. Oguchi. Theory of Spin-Wave Interactions in Ferro- and Antiferromagnetism. *Physical Review*, 117(1):117–123, 1960.
- [PTVF02] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C++*. Cambridge University Press, 2002.

- [Rei06] A. A. Reischl. *Derivation of Effective Models using Self-Similar Continuous Unitary Transformations in Real Space*. PhD thesis, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln, 2006.
- [RMHU04] A. Reischl, E. Müller-Hartmann, and G. S. Uhrig. Systematic mapping of the Hubbard model to the generalized $t - J$ model. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 70(24):245124, 2004.
- [RW99] M. Ragwitz and F. Wegner. Flow equations for electron-phonon interactions: phonon damping. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 8(1):9–17, 1999.
- [SCGO93] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, and H. R. Ott. Superconductivity above 130K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system. *Nature*, 363:56–58, 1993.
- [Sch65] J. Schwinger. *Quantum Theory of Angular Momentum*. Academic, New York, 1965.
- [Sch05] F. Schwabl. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)*. Springer, Berlin, 2005.
- [SJKM89] S. Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, and M. Ma. Bosonic mean-field theory of quantum Heisenberg spin systems: Bose condensation and magnetic order. *Physical Review B*, 40(7):5028–5035, 1989.
- [SL00] J. Schnack and M. Luban. Rotational modes in molecular magnets with antiferromagnetic Heisenberg exchange. *Physical Review B*, 63(1):014418, 2000.
- [Ste81] P. M. Stevenson. Optimized perturbation theory. *Physical Review D*, 23:2916–2944, 1981.
- [Ste97] J. Stein. Flow equations and the strong-coupling expansion for the Hubbard model. *Journal of Statistical Physics*, 88(1-2):487–511, 1997.
- [SU06] K. P. Schmidt and G. S. Uhrig. Hard-core magnons in the $S = 1/2$ Heisenberg model on the square lattice. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(17):172407, 2006.
- [Weg] F. Wegner. Wick's Theorem and Normal Ordering. <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/~wegner/>.
- [Weg94] F. Wegner. Flow equations for Hamiltonians. *Annalen der Physik*, 3(2):77–91, 1994.
- [ZR88] F. C. Zhang and T. M. Rice. Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides. *Physical Review B*, 37(7):3759–3761, 1988.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Prof. Dr. Götz S. Uhrig für die Vergabe des Themas sowie die hervorragende Betreuung während der gesamten Arbeit bedanken. Herrn Prof. Dr. Weber möchte ich für die Übernahme des Zweitgutachtens danken.

Ein besonderer Dank gilt auch Sebastian Duffe, der mir sein Programm zur Verfügung stellte, so dass mir ein großer Teil an Programmierarbeit abgenommen wurde. Ebenfalls möchte ich mich bei ihm für die vielen Diskussionen sowie für das Korrekturlesen bedanken. Auch bei Isabelle Exius möchte ich mich für die Durchsicht mehrerer Kapitel der vorliegenden Arbeit bedanken.

Weiterhin möchte ich der gesamten Arbeitsgruppe für die Hilfsbereitschaft sowie die angenehme Arbeitsatmosphäre danken.

Bei meiner Familie möchte ich mich bedanken für die durchgehende Unterstützung in jeglicher Hinsicht. Nicht zuletzt möchte ich auch meiner Freundin Christina danken, der ich viele erholsame und schöne Stunden meines Lebens fern ab der Physik verdanke.

Erklärung

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

Tim Fischer