

# Pseudo-Spin Anregungen des Ising-Modells im transversalen Magnetfeld auf dem hyperkubischen Gitter

Bachelorarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Bachelor of Science

vorgelegt von  
Julia Röchner  
geboren in Herne

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund  
2014

1. Gutachter : Dr. Kai P. Schmidt
2. Gutachter : Prof. Dr. Joachim Stolze

Datum des Einreichens der Arbeit: 25. Juni 2014

## Kurzfassung

In dieser Arbeit wird das Ising-Modell im transversalen Magnetfeld auf dem hyperkubischen Gitter bei  $T = 0$  K untersucht. Dazu werden die Grundzustandsenergie, die Dispersion des ersten angeregten Zustands sowie die Anregungslücke in verschiedenen Dimensionen für die geordnete Phase, d.h. für den Fall kleiner Magnetfelder, perturbativ bis zur 2. Ordnung betrachtet. Die Ergebnisse werden dann auf beliebige Dimensionen  $d$  verallgemeinert. Es stellt sich heraus, dass der Phasenübergang, der die geordnete Phase von der polarisierten Phase trennt, für den Fall  $d = \infty$  exakt zu berechnen ist. Daher wird im zweiten Teil der Arbeit die Grundzustandsenergie mit Hilfe der Molekularfeldtheorie sowie die Energielücke, basierend auf der Spinwellentheorie, in unendlichen Dimensionen bestimmt. Die Ergebnisse liefern die exakte Lage des kritischen Punktes in  $d = \infty$ .

## Abstract

This thesis is about the examination of the transverse field Ising-model on the hypercubic lattice for  $T = 0$  K. For this purpose the energy of the ground state, the dispersion of the elementary excitation as well as the excitation gap are calculated in various dimensions using second-order perturbation theory. The focus is laid on the ordered phase, that exists in case of low magnetic fields. The results are generalised to arbitrary dimensions  $d$ . It turns out that the quantum phase transition, which separates the ordered phase from the polarised phase, can be determined exactly in the limit  $d = \infty$ . Because of this, the second part of this thesis is about the analytical calculation of the ground-state energy and the energy gap using mean-field and spin-wave theory. The outcome provides the exact position of the critical point in  $d = \infty$ .

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>IV</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Elementare Anregungen des TFIM</b>	<b>3</b>
<b>3 Perturbative Betrachtung der geordneten Phase</b>	<b>7</b>
3.1 Eine Dimension . . . . .	7
3.1.1 Grundzustand der polarisierten Phase . . . . .	8
3.1.2 Erster angeregter Zustand der polarisierten Phase . . . . .	8
3.1.3 Geordnete Phase . . . . .	10
3.2 Zwei und drei Dimensionen . . . . .	11
3.2.1 Grundzustand . . . . .	11
3.2.2 Erster angeregter Zustand . . . . .	12
3.3 Beliebige Dimensionen $d$ . . . . .	14
<b>4 Molekularfeld- und Spinwellentheorie in <math>d = \infty</math></b>	<b>16</b>
4.1 Exakte Grundzustandsenergie . . . . .	16
4.2 Ordnung des Phasenübergangs . . . . .	17
4.3 Magnetisierung und kritischer Exponent . . . . .	19
4.4 Exakte Energielücke . . . . .	21
<b>5 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>25</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>26</b>

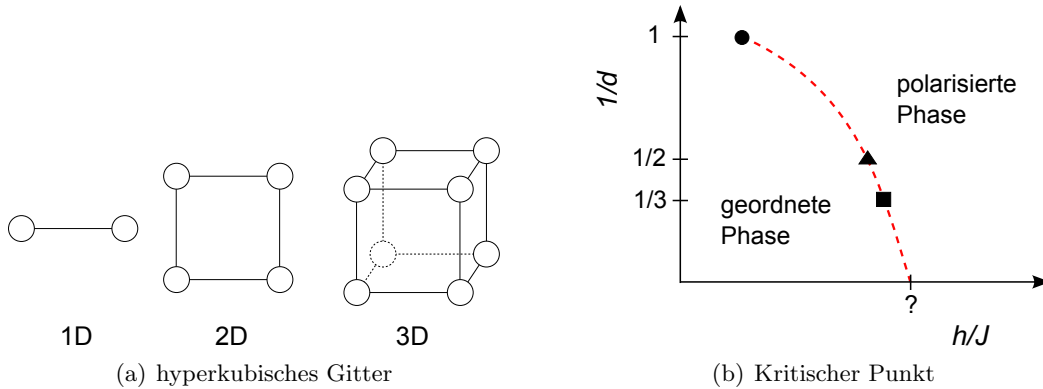
# 1 Einleitung

In der theoretischen Festkörperphysik werden häufig mikroskopische Modelle entwickelt, um Eigenschaften eines Festkörpers beschreiben zu können. Festkörper bestehen aus Atomen, die jeweils ein magnetisches Moment besitzen, welches durch den Spin verursacht wird. Diese Spins sind, unter der Annahme, dass Freiheitsgrade wie Ladungen, Orbitale der Hüllenelektronen oder Gitterschwingungen keine Rolle spielen, auf periodischen Gittern lokalisiert und richten sich abhängig von der magnetischen Austauschwechselwirkung aus. Interessant ist oft die Natur des Grundzustandes bei  $T = 0$  K, in dem die Energie des Festkörpers minimal ist. Führt man dem System Energie zu, zum Beispiel in Form von Neutronen, die auf den Festkörper geschossen werden, kann dieses in einen höheren Energiezustand übergehen. Diese Anregungen entsprechen häufig Spinflips, die auch als Teilchen interpretiert werden können. Ebenfalls von Interesse ist daher die Energie, die nötig ist, um vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand überzugehen.

Untersucht man einen Festkörper in Abhängigkeit einer bestimmten Größe, welche beispielsweise ein Magnetfeld oder die Temperatur sein kann, ist meist ein Phasenübergang zu beobachten, der die Phase bei niedrigem Magnetfeld oder bei niedriger Temperatur von der Phase bei hohem Magnetfeld bzw. hoher Temperatur trennt. Naheliegend ist die Betrachtung eines dreidimensionalen Festkörpers, aber auch Untersuchungen in einer und zwei Dimensionen sind nicht unrealistisch, wenn die einzelnen Spins anisotrop gekoppelt sind. In der Vergangenheit stellte sich allerdings heraus, dass zwei- und dreidimensionale Systeme häufig schwierig zu behandeln und Größen wie Grundzustandsenergie, Anregungsenergie oder die Lage des kritischen Punktes, an dem der Phasenübergang stattfindet, oft nicht exakt zu bestimmen sind. Beschränkt man sich auf ein hyperkubisches Gitter (Abbildung 1.1 (a)), fällt auf, dass die Anzahl nächster Nachbarn  $z$  eines Teilchens mit der Dimension  $d$  skaliert. Es stellt sich daher die interessante Frage, ob eine Betrachtung des Limes  $d \rightarrow \infty$ , was einhergeht mit  $z \rightarrow \infty$ , eine Möglichkeit bietet, um Eigenschaften eines realen Festkörpers sinnvoll zu beschreiben. Der Vorteil beim Übergang zu unendlich hohen Dimensionen ist, dass die Physik dort oftmals einfacher zu behandeln und manchmal sogar exakt zu beschreiben ist. In [1] wird beispielsweise die Lage des kritischen Punktes in Ordnungen von  $1/d$  für ein Modell gekoppelter Dimere bestimmt, sodass im Limes  $d \rightarrow \infty$  alle Korrekturen verschwinden und der kritische Punkt exakt bestimmbar wird. Die Bestimmung des Phasenübergangs ist besonders interessant, da an diesem Punkt die Anregungsenergie verschwindet und damit das Teilchenbild zur Beschreibung der Anregungen zusammenbricht.

In dieser Arbeit wird das Ising-Modell im transversalen Magnetfeld (TFIM) auf dem hyperkubischen Gitter näher untersucht, welches von Ernst Ising 1925 entwickelt wurde und in diesem Zusammenhang ein Standardmodell zur Untersuchung von ferro- oder antiferromagnetischen Festkörpern darstellt. Es beruht auf der Annahme, dass lediglich nächste Nachbarspins mit der Kopplungskonstanten  $J$  gekoppelt sind und ein transversales Magnetfeld  $h$  am Festkörper anliegt. Dieses Modell besitzt typischerweise zwei

Phasen: zum einen die geordnete oder spontan symmetriebrechende Phase, die sich bei kleinen Magnetfeldern  $h$  einstellt, und zum anderen die polarisierte Phase, die die Symmetrie des Hamiltonoperators nicht bricht und die für den Fall hoher Magnetfelder existiert. Das reine Ising-Modell ohne Magnetfeld konnte bereits für eine Dimension von Ernst Ising und für zwei Dimensionen von Lars Onsager, mit variabler Temperatur anstelle des transversalen Magnetfeldes, analytisch exakt gelöst werden [2, 3]. Ebenfalls exakt lösbar ist das eindimensionale TFIM bei angelegtem transversalen Magnetfeld mit Hilfe der Jordan-Wigner-Transformation [4, 5]. Hier ergibt sich ein Phasenübergang bei  $(h/J)_{1D} = 1$ . In zwei und drei Dimensionen kann die Lage des kritischen Punktes zwar nicht mehr analytisch exakt bestimmt werden, allerdings liefern hier numerische Berechnungen sehr gute Ergebnisse. In [6] konnte für zwei und drei Dimensionen (Abbildung 1.1 (a)) der Phasenübergang an den Stellen  $(h/J)_{2D} = 3,04439(2)$  und  $(h/J)_{3D} = 5,15813(6)$  ermittelt werden. Eine beispielhafte Skizze zur Veranschaulichung des kritischen Punktes  $(h/J)_c$  in Abhängigkeit von  $1/d$  ist in Abbildung 1.1 (b) dargestellt.



**Abbildung 1.1:** Abbildung (a) zeigt das hyperkubische Gitter beispielhaft für eine, zwei und drei Dimensionen. Abbildung (b) skizziert einen möglichen Verlauf der Kurve, die den kritischen Punkt in Abhängigkeit der inversen Dimension  $1/d$  wiedergibt.

Obwohl das TFIM verhältnismäßig einfach ist, besitzt es für beliebige Dimensionen  $d$  einen Phasenübergang auf dem hyperkubischen Gitter, der insbesondere im Grenzfall  $d \rightarrow \infty$  noch existiert. Dieser Grenzfall kann somit ein guter Ausgangspunkt zur Ermittlung von Phasenübergängen in endlichen Dimensionen sein. Der Schwerpunkt dieser Arbeit wird auf der Untersuchung der geordneten Phase und deren Anregungen liegen. Parallel hierzu liegt in der Bachelorarbeit [7] der Fokus auf der polarisierten Phase. Die Bachelorarbeit ist folgendermaßen gegliedert: in Kapitel 2 wird zunächst das TFIM erläutert und zu den zwei unterschiedlichen Phasen passende Teilchenbilder vorgestellt. Im 3. Kapitel wird die Grundzustandsenergie und die Anregungsenergie störungstheoretisch für beliebige Dimensionen in der geordneten Phase berechnet. In Kapitel 4 wird für  $d = \infty$  die Grundzustandsenergie sowie die Energielücke analytisch mit Hilfe der Molekularfeldnäherung und der Spinwellentheorie bestimmt. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse sowie ein Ausblick befinden sich im letzten Kapitel 5.

## 2 Elementare Anregungen des TFIM

In dieser Arbeit wird ein ferromagnetischer Festkörper in beliebigen Dimensionen  $d$  mit Hilfe des Ising-Modells im transversalen Magnetfeld mit dem Hamiltonoperator

$$H_{\text{Ising}} = h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z - J \sum_{i,n} \sigma_i^x \sigma_{i+n}^x \quad (2.1)$$

untersucht, wobei  $J > 0$  der Kopplungskonstanten zwischen nächsten Nachbarspins entspricht und  $h > 0$  die Stärke des angelegten Magnetfeldes beschreibt. Der Summationsindex  $n$  durchläuft dabei alle positiven Nachbarn des Spins  $i$ . Die Operatoren  $\sigma^x$  und  $\sigma^z$  stellen die Paulimatrizen dar. Der Hamiltonian beschreibt Spins, die auf einem hyperkubischen Gitter mit  $N$  Plätzen lokalisiert sind.

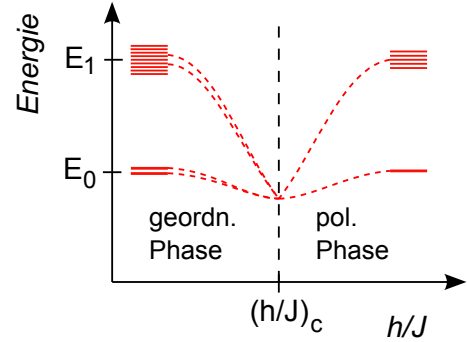
Perturbativ kann  $H_{\text{Ising}}$  für die Grenzfälle  $h \gg J$  und  $h \ll J$  betrachtet werden. Im Fall hoher Magnetfelder stellt sich die sogenannte polarisierte Phase ein und der erste Summand in Gleichung (2.1) entspricht dem ungestörten Hamiltonian  $H_0$ . Der zweite Summand ist für die Störung verantwortlich und wird mit  $V$  bezeichnet.

Im Grenzfall  $J = 0$  ist  $|\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$  der Grundzustand der Kette, da dies ein Eigenzustand von  $H_0$  mit Eigenwert  $-N$  ist und die Energie damit minimiert. Die höchste Anregung entspricht dem Zustand  $|\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ , da dies ein Eigenzustand von  $H_0$  ist mit dem Eigenwert  $+N$  und damit die Energie maximal ist. Der erste angeregte Zustand ist  $N$ -fach entartet und ist von der Form  $|\downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow\rangle$ , d.h. genau ein Spin ist geflippt.

Für den Fall eines kleinen angelegten Magnetfeldes  $h$  befindet sich der Festkörper in der geordneten Phase und der Summand in (2.1), der  $J$  enthält, entspricht dem ungestörten Hamiltonian  $H_0$ , wohingegen der Summand, der das Magnetfeld  $h$  beinhaltet, die Störung  $V$  beschreibt. Es handelt sich um eine ferromagnetische Ausrichtung, denn im Grundzustand des Systems für den Grenzfall  $h = 0$  sind alle Spins nach rechts oder links ausgerichtet, da dies die Eigenzustände von  $\sigma^x$  mit Eigenwerten  $\pm 1$  sind. Die Zustände  $|\rightarrow\rangle$  und  $|\leftarrow\rangle$  ergeben sich aus Linearkombinationen von Spin-Up und Spin-Down, d.h.

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) \quad \text{und} \quad |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle) \quad . \quad (2.2)$$

Aufgrund der unterschiedlichen Entartungen der Grundzustände in beiden Phasen kann auf einen Phasenübergang bei einem kritischen Wert  $(h/J)_c$  geschlossen werden (Abbildung 2.1).



**Abbildung 2.1:** Skizze zur Veranschaulichung eines Phasenübergangs. Die durchgezogenen Linien sollen jeweils auf dem Niveau von  $E_0$  und  $E_1$  liegen und sind lediglich zur Verdeutlichung der Entartung untereinander gezeichnet.

Die Natur dieser lückenbehafteten Phasen ist unabhängig von der Dimension  $d$  und kann daher für allgemeine  $d$  untersucht werden. Es stellt sich heraus, dass zur Beschreibung der Anregungen in beiden Phasen die Einführung eines geeigneten Teilchenbildes sinnvoll ist. Der Einfachheit halber werden diese für eine Dimension vorgestellt, sie sind jedoch auf beliebige Dimensionen übertragbar. Der eindimensionale Hamiltonoperator beschreibt die Physik auf einer periodisch gekoppelten Kette mit  $N$  Plätzen. Es wird zunächst das Teilchenbild für die polarisierte Phase eingeführt, welches völlig äquivalent zum Spinbild ist, aber eine anschauliche Interpretation ermöglicht. Dazu werden Hardcore-Bosonen benutzt, die zwar keine antisymmetrische Wellenfunktion besitzen, sich aber lokal wie Fermionen verhalten, was bedeutet, dass maximal nur ein Teilchen pro Platz existieren darf. Wenn also im Grundzustand keine Teilchen existieren und im ersten angeregten Zustand, d.h. wenn ein Spin geflippt ist, genau ein Teilchen existiert, lässt sich das folgendermaßen ausdrücken:

$$|\downarrow\rangle_i \hat{=} |0\rangle_i \quad \text{und} \quad |\uparrow\rangle_i \hat{=} |1\rangle_i \quad . \quad (2.3)$$

Der Index  $i$  geht von 1 bis  $N$  und gibt die Stelle der Kette an. Der Hamiltonoperator kann nun durch Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren  $b$  und  $b^\dagger$  ausgedrückt werden, welche ein Teilchen an einem Platz vernichten können, für den Fall, dass eines vorhanden ist und umgekehrt. Es gilt demnach

$$b|0\rangle = 0 \quad \text{und} \quad b|1\rangle = |0\rangle \quad , \quad (2.4)$$

$$b^\dagger|0\rangle = |1\rangle \quad \text{und} \quad b^\dagger|1\rangle = 0 \quad . \quad (2.5)$$

Mit dem Wissen, dass  $\sigma^x$  einen Spinflip bewirkt, während  $\sigma^z$  lediglich das Vorzeichen des Zustands  $|0\rangle$  ändert, können die Paulimatrizen durch

$$\sigma^z = 2b^\dagger b - 1 = 2n - 1 \quad \text{und} \quad \sigma^x = b + b^\dagger \quad (2.6)$$

ersetzt werden, wobei  $n$  der Anzahloperator mit  $n|0\rangle = 0$  und  $n|1\rangle = |1\rangle$  ist. Insgesamt lässt sich der Hamiltonian daher umschreiben zu

$$H = h \sum_{i=1}^N (2n_i - 1) - J \sum_{i=1}^N (b_i + b_i^\dagger)(b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger) \quad (2.7)$$

$$= -Nh + 2h \sum_{i=1}^N n_i - J \sum_{i=1}^N \underbrace{(b_i^\dagger b_{i+1} + b_i b_{i+1}^\dagger)}_{T_{0,i}} + \underbrace{b_i b_{i+1}}_{T_{-2,i}} + \underbrace{b_i^\dagger b_{i+1}^\dagger}_{T_{+2,i}} \quad (2.8)$$

$$= -Nh + 2h \sum_{i=1}^N n_i - J(T_0 + T_{-2} + T_{+2}) = H_0 + V \quad . \quad (2.9)$$

Dabei kann  $T_0$  ein Teilchen, sofern eines vorhanden ist, vernichten und am Nachbarplatz erzeugen und beschreibt damit ein Hüpfen des Teilchens. Der Operator  $T_{-2}$  kann zwei Teilchen nebeneinander vernichten, während  $T_{+2}$  zwei Teilchen nebeneinander erzeugen kann, weshalb sie im Gegensatz zu  $T_0$  nicht teilchenzahlerhaltend sind.



Beim Versuch die geordnete Phase zu beschreiben, stellt sich heraus, dass es sinnvoll ist ein anderes Teilchenbild einzuführen, bei dem die Teilchen nicht auf den Gitterplätzen, sondern auf den Verbindungen zwischen zwei Spins sitzen. Da der Grundzustand im Grenzfall  $h \ll J$  aus Linearkombinationen von Spin-Up und Spin-Down besteht und diese die Rechnung erschweren würden, wird zunächst das Koordinatensystem mit Hilfe einer geeigneten Transformationsmatrix so gedreht, dass sich der Hamiltonoperator

$$\tilde{H} = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i^x - J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z = \tilde{V} + \tilde{H}_0 \quad (2.10)$$

ergibt, welcher im Gegensatz zur polarisierten Phase zwei Grundzustände  $|\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$  besitzt. Außerdem unterscheiden sich die ersten angeregten Zustände beider Fälle. Dazu stelle man sich eine unendlich lange, an den Enden nicht gekoppelte Kette vor. Wird ein Spin mitten in der Kette geflippt, beträgt die Energie  $E_2 = -NJ + 4J$ , da durch den Spinflip zwei antiferromagnetische Ausrichtungen entstehen, die jeweils den Beitrag  $2J$  zur Gesamtenergie leisten. Geht man aber davon aus, dass links oder rechts neben dem geflippten Spin alle anderen Spins ebenfalls geflippt sind, existiert lediglich noch eine antiferromagnetische Ausrichtung, wodurch die Energie nur noch  $E_1 = -NJ + 2J$  beträgt. Damit entsprechen alle Zustände der Form  $|\downarrow \dots \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$  oder  $|\uparrow \dots \uparrow \downarrow \dots \downarrow\rangle$  einer ersten Anregung des Systems (Siehe Abbildung 2.2). Die antiferromagnetische Ausrichtung, d.h. die Stelle, an der vom einen Grundzustand in den anderen gewechselt wird, nennt man "Domänenwand".

Es werden nun Pseudospins eingeführt, die auf den Kopplungen zwischen den wirklichen Spins sitzen [4]. Es gilt

$$|\uparrow\uparrow\rangle \text{ bzw. } |\downarrow\downarrow\rangle \hat{=} |\Downarrow\rangle \quad \text{und} \quad |\uparrow\downarrow\rangle \text{ bzw. } |\downarrow\uparrow\rangle \hat{=} |\Uparrow\rangle, \quad (2.11)$$

d.h. der Pseudospin zeigt nach unten, wenn eine ferromagnetische Ausrichtung vorliegt, und er zeigt nach oben, wenn die beiden wirklichen Spins antiferromagnetisch gekoppelt sind.



**Abbildung 2.2:** Grundzustand und 1. angeregter Zustand für  $h \ll J$ . Die grünen ausgefüllten Dreiecke stellen eine Anregung der Pseudospins dar, während die leeren Dreiecke die Pseudospins im Grundzustand veranschaulichen.

Sei nun der Grundzustand  $|\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$ . Wird ein Spin geflippt, wirkt sich dies auf die beiden Nachbarpseudospins aus, d.h. die ferromagnetische wird zur antiferromagnetischen Ausrichtung und umgekehrt. Betrachtet man den  $\tilde{H}_0$ -Term in Gleichung (2.10), liefert dieser  $-J$ , wenn er auf eine ferromagnetische Ausrichtung  $|\uparrow\uparrow\rangle$  oder  $|\downarrow\downarrow\rangle$  bzw.  $+J$ , wenn er auf eine antiferromagnetische Ausrichtung  $|\downarrow\uparrow\rangle$  oder  $|\uparrow\downarrow\rangle$  wirkt. Dies kann auch durch den Hamiltonoperator

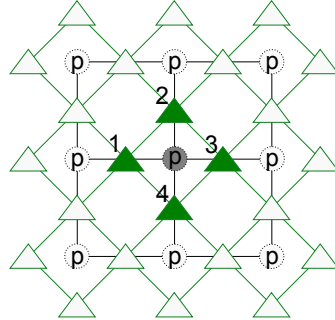
$$H^{1D} = J \underbrace{\sum_{v=1}^N \tau_v^z}_{H_0} - h \underbrace{\sum_{v=1}^N \tau_v^x \tau_{v+1}^x}_V, \quad (2.12)$$

beschrieben werden, wobei  $\tau^x$  und  $\tau^z$  den Pauli-Matrizen  $\sigma^x$  und  $\sigma^z$  entsprechen mit dem Unterschied, dass sie sich auf die Pseudospins beziehen. Der Grundzustand ist nun  $|\Downarrow\Downarrow\Downarrow \dots \Downarrow\rangle$ . Die Pseudospins lassen sich ebenso wie die richtigen Spins als Teilchen interpretieren. Ein Vergleich mit dem Hamiltonoperator (2.1) liefert die Erkenntnis, dass sich dieser und der für niedrige Magnetfelder (2.12) nur durch die Vertauschung von  $h$  und  $J$  unterscheiden. Demnach können im eindimensionalen Fall alle Ergebnisse für die polarisierte Phase auf die geordnete Phase übertragen werden, unter der Voraussetzung, dass  $h$  und  $J$  in den entsprechenden Hamiltonoperatoren getauscht werden.

Da in dieser Arbeit der Schwerpunkt auf die geordnete Phase gelegt wird, soll der Pseudospin-Hamiltonoperator (2.12) auf beliebige Dimensionen verallgemeinert werden. Da sich die Pseudospins ebenfalls durch Hardcore-Bosonen beschreiben lassen, können die  $\tau$ -Matrizen durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ersetzt werden, wodurch sich der  $d$ -dimensionale Hamiltonoperator zu

$$H^{dD} = J \sum_{v=1}^{N_b} \tau_v^z - h \sum_{p=1}^N \prod_{i=1}^{2d} \tau_{i,p}^x = \underbrace{-dJN + 2J \sum_{v=1}^{dN} n_v}_{H_0} - h \underbrace{\sum_{i=-d}^d T_{2i}}_V \quad (2.13)$$

ergibt. Die Anzahl der Pseudospins  $N_b$  (“b“ wie “bond“) wächst extensiv mit der Dimension, weshalb die Summe über alle Verbindungen  $dN$  beträgt. Sie sind daher auf einem hyperkubischen Gitter mit  $dN$  Gitterplätzen lokalisiert. Der Parameter  $p$  gibt die Plakette an, auf die die  $T$ -Operatoren wirken. Die Anzahl aller Plaketten ist gleichzusetzen mit der Anzahl an Gitterplätzen  $N$ . Betrachtet man beispielsweise ein Quadratgitter, muss in (2.13)  $d = 2$  gesetzt werden. Im ersten angeregten Zustand, d.h. wenn genau ein Teilchen vorhanden ist, ist die Plakette um dieses Teilchen vollständig geflippt (Abbildung 2.3).



**Abbildung 2.3:** Veranschaulichung des 1. angeregten Zustands mit Hilfe von Pseudospins in 2 Dimensionen

Im Gegensatz zur Kette ist eine Domänenwand nicht mehr die niedrigsten Anregung, da diese im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  unendlich viele antiferromagnetische Ausrichtungen zur Folge hätte. Allgemein zieht sich bei höheren Anregungen eine “Domänenlinie“ durch das Gitter.

Im nächsten Kapitel wird die Grundzustands- und die Anregungsenergie perturbativ bis zur 2. Ordnung für eine Dimension der polarisierten sowie der geordneten Phase berechnet, bevor die geordnete Phase weiter in höheren Dimensionen auf Basis der Pseudospin-Darstellung untersucht wird.

### 3 Perturbative Betrachtung der geordneten Phase

Ziel dieses Kapitels ist es, ein Verständnis der Anregungen in der geordneten Phase mittels entarteter Störungstheorie zu gewinnen. Die geordnete Phase wird dementsprechend für beliebige Dimensionen  $d$  behandelt. Im Spezialfall  $d = 1$  wird gezeigt, dass die Ergebnisse in beiden Phasen identisch sind, obwohl die Natur der Anregungen verschieden ist.

Betreibt man entartete Störungstheorie bis zu 2. Ordnung, erhält man den effektiven Hamiltonoperator [8]

$$H_{\text{eff},i} = \underbrace{P_i H_0 P_i}_{0. \text{ Ordnung}} + \underbrace{P_i V P_i}_{1. \text{ Ordnung}} + \underbrace{P_i V Q_i \frac{1}{E^{(0)} - Q_i H_0 Q_i} Q_i V P_i}_{2. \text{ Ordnung}} + \mathcal{O}(V^3) \quad , \quad (3.1)$$

wobei der Projektionsoperator  $P_i$  eingeführt wird, der im Falle der Untersuchung des  $i$ -Teilchen-Zustands auf den  $i$ -Teilchen-Hilbertraum projiziert. Dies ist notwendig, da bei der Berechnung der Energien nur die des  $i$ -Teilchen-Zustands interessiert und somit Energien anderer Zustände unterdrückt werden. Der  $i$ -Teilchen-Zustand wird also in  $H_{\text{eff}}$  vom restlichen Hilbertraum entkoppelt. Der Operator  $Q_i = 1 - P_i$  projiziert dabei auf alle anderen Zustände außer den  $i$ -Teilchen-Zustand. Da hier nur der 0-Teilchen- und der 1-Teilchen-Zustand betrachtet wird, gilt  $i = \{0,1\}$ .

Es wird sich herausstellen, dass im Gegensatz zum 0-Teilchen-Zustand die 1-Teilchen-Zustände bzgl.  $H_{\text{eff}}$  nicht diagonal sind. Daher muss bei der Berechnung der Energie des ersten angeregten Zustands der Hamiltonoperator mittels Fouriertransformation diagonalisiert werden. Dadurch wird dem Teilchen ein Impuls  $\vec{k}$  zugeordnet, der in beliebigen Dimensionen die Komponenten  $k_1$  bis  $k_d$  besitzt. Obwohl der erste angeregte Zustand in der geordneten Phase in den Dimensionen  $d > 1$  durch eine ganze Plakette von Teilchen beschrieben wird, kann auch diese Anregung nur durch einen Schwerpunktsimpuls beschreiben werden, da keine Relativbewegung zwischen den Teilchen existiert. Man beachte, dass sich der Schwerpunkt genau auf den Plätzen des ursprünglichen hyperkubischen Gitters befindet.

In den folgenden Berechnungen wird zur besseren Übersicht auf den Index 0 bzw. 1 der Projektoren  $P$  und  $Q$  verzichtet.

#### 3.1 Eine Dimension

Im Folgenden wird der Grundzustand  $|000\dots 0\rangle$  durch  $|0\rangle$  ersetzt, während die 1-Teilchen-Zustände durch  $|j\rangle$  beschrieben werden, wobei  $j$  angibt, an welcher Stelle sich das Teilchen befindet. In einer Dimension entspricht das System einer periodisch gekoppelten Kette. Diese wird zunächst für den Fall hoher Magnetfelder  $J/h \ll 1$  untersucht.

### 3.1.1 Grundzustand der polarisierten Phase

Wird die Grundzustandsenergie betrachtet, projiziert  $P$  auf den 0-Teilchen-Zustand. Die Energie des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$  beträgt

$$E_0^{(0)} = \langle 0 | P H_0 P | 0 \rangle = \langle 0 | P \left( -Nh + 2h \sum_{i=1}^N n_i \right) | 0 \rangle = -Nh \quad . \quad (3.2)$$

In 1. Ordnung Störungstheorie verschwindet die Energiekorrektur

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | P V P | 0 \rangle = -J \langle 0 | P (T_0 + T_{-2} + T_{+2}) | 0 \rangle = 0 \quad , \quad (3.3)$$

da die Anwendung von  $T_{+2}$  und  $T_{-2}$  auf den Vakuumzustand  $|0\rangle$  aus dem 0-Teilchen-Hilbertraum hinausführt und  $T_0$  nur wirken kann, wenn überhaupt ein Teilchen vorhanden ist.

Die Energiekorrektur in 2. Ordnung ergibt sich zu

$$E_0^{(2)} = \langle 0 | P V Q \frac{1}{E_0^{(0)} - Q H_0 Q} Q V P | 0 \rangle = \langle 0 | P T_{-2} Q \frac{J^2}{E_0^{(0)} - Q H_0 Q} Q T_{+2} | 0 \rangle \quad (3.4)$$

$$= \langle 0 | P T_{-2} Q \frac{J^2}{E_0^{(0)} - Q H_0 Q} Q \sum_{i=1}^N |i\rangle |i+1\rangle \quad (3.5)$$

$$= \langle 0 | P T_{-2} \left( -\frac{J^2}{4h} \right) \sum_{i=1}^N |i\rangle |i+1\rangle = -\frac{J^2}{4h} N \quad . \quad (3.6)$$

Dabei wurde verwendet, dass nur  $T_{+2}$  auf den Grundzustand wirken kann und eine Summe über  $N$  2-Teilchen-Zustände erzeugt. Auf der linken Seite kann nur  $P T_{-2}$  einen Wert liefern, da alle Zustände, die keine 0-Teilchen-Zustände sind und auf die der Projektor  $P$  wirkt, Null ergeben würden. Aus der Differenz zwischen der Energie eines 0-Teilchen-Zustands und einem 2-Teilchen-Zustand erhält man den Nenner  $-4h$ . Die gesamte Grundzustandsenergie bis zur 2. Ordnung lautet daher

$$E_0^{1D, \text{pol}} = -Nh - \frac{J^2}{4h} N \quad \text{bzw.} \quad e_0^{1D, \text{pol}} = \frac{E_0}{N} = -h - \frac{J^2}{4h} \quad . \quad (3.7)$$

Dabei bezeichnet  $e_0$  die Energie pro Platz. Zur Berechnung der Anregungsenergie werden nun die 1-Teilchen-Zustände betrachtet, welche die niedrigste Anregung des Systems darstellen.

### 3.1.2 Erster angeregter Zustand der polarisierten Phase

Der Projektor  $P$  erfüllt nun die Forderung, dass alle Zustände, auf die er wirkt, auf die 1-Teilchen-Zustände projiziert werden. Für die Energie des ungestörten Hamiltonians

des ersten angeregten Zustands gilt

$$E_1^{(0)} = \langle j | PH_0P | j \rangle = \langle j | P \left( -Nh + 2h \sum_{i=1}^N n_i \right) | j \rangle = -Nh + 2h \quad . \quad (3.8)$$

Die Rechnung für die Energiekorrektur in 1. Ordnung liefert

$$PVP | j \rangle = -JP(T_0 + T_{-2} + T_{+2}) | j \rangle = -JPT_0 | j \rangle \quad (3.9)$$

$$= -JP \sum_{i=1}^N T_{0,i} | j \rangle = -J(|j-1\rangle + |j+1\rangle) \quad . \quad (3.10)$$

Es kann wiederum nur der Operator  $T_0$  einen Beitrag leisten. Dieser ist in der Lage, das Teilchen auf einen Nachbarplatz hüpfen zu lassen.

Betreibt man 2. Ordnung Störungstheorie mit dem 1-Teilchen-Zustand, ergibt sich

$$PVQ \frac{1}{E_1^{(0)} - QH_0Q} QVP | j \rangle = PT_{-2}Q \frac{J^2}{E_1^{(0)} - QH_0Q} QT_{+2} | j \rangle \quad (3.11)$$

$$= PT_{-2}Q \frac{J^2}{E_1^{(0)} - QH_0Q} Q \sum_{i \neq j, j-1} | j \rangle | i \rangle | i+1 \rangle \quad (3.12)$$

$$= PT_{-2}Q \left( -\frac{J^2}{4h} \right) \sum_{i \neq j, j-1} | j \rangle | i \rangle | i+1 \rangle \quad (3.13)$$

$$= -\frac{J^2}{4h} (|j-2\rangle + |j+2\rangle + (N-2)|j\rangle) \quad . \quad (3.14)$$

$T_{+2}$  bewirkt, dass aus dem 1-Teilchen-Zustand eine Summe aus  $(N-2)$  3-Teilchen-Zuständen wird. Die Differenz aus  $E_1^{(0)}$  und  $E_3^{(0)}$  hat den Nenner  $-4h$  zur Folge. Das Ergebnis (3.14) zeigt, dass in 2. Ordnung Störungsrechnung Sprünge um zwei Plätze möglich sind. Außerdem ist festzustellen, dass der Hamiltonoperator bzgl.  $|j\rangle$  nicht diagonal ist, da in 1. und 2. Ordnung Störungsrechnung der ursprüngliche Zustand verändert wird. Da die eindimensionale Kette translationssymmetrisch ist, bewirkt der Hamiltonoperator keine Impulsänderung. Es ist daher sinnvoll mittels Fouriertransformation in den Impulsraum zu wechseln, da dort die 1-Teilchen-Zustände Eigenzustände von  $H_{\text{eff}}$  sind. Aus der Energie des ersten angeregten Zustands lässt sich dann die Anregungsenergie bestimmen.

Die Fouriertransformierte des 1-Teilchen-Zustands  $|j\rangle$  lautet

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} |j\rangle \quad . \quad (3.15)$$

Während die Energie von  $H_0$  unverändert bleibt, ergibt sich mit (3.10) und unter Ausnutzung periodischer Randbedingungen für die Energiekorrektur in 1. Ordnung

$$PVP|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} PVP|j\rangle = -J \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} (|j-1\rangle + |j+1\rangle) \quad (3.16)$$

$$= -J \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \left[ e^{-ik(j+1)} |j\rangle + e^{-ik(j-1)} |j\rangle \right] = -2J \cos k |k\rangle \quad . \quad (3.17)$$

In 2. Ordnung beträgt die Energiekorrektur mit (3.14)

$$PVP \frac{1}{E_1^{(0)} - QH_0Q} QVP|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} PVP \frac{1}{E_1^{(0)} - QH_0Q} QVP|j\rangle \quad (3.18)$$

$$= -\frac{J^2}{4J} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \left[ e^{-ik(j+2)} |j\rangle + e^{-ik(j-2)} |j\rangle + (N-2)e^{-ikj} |j\rangle \right] \quad (3.19)$$

$$= -\frac{J^2}{4J} (2 \cos(2k) + N - 2) |k\rangle \quad . \quad (3.20)$$

Insgesamt ergibt sich die Energie

$$E_1^{\text{1D,pol}}(k) = -Nh - \frac{J^2}{4h} N + 2h - 2J \cos k + \frac{J^2}{2h} - \frac{J^2}{2h} \cos(2k) \quad . \quad (3.21)$$

Dabei entspricht  $-Nh - \frac{J^2}{4h} N$  der Grundzustandsenergie. Da die Dispersionsrelation die Anregungsenergie beschreibt, ergibt sie sich aus der Differenz von  $E_1$  und  $E_0$  zu

$$\omega^{\text{1D,pol}}(k) = E_1(k) - E_0 = 2h - 2J \cos k + \frac{J^2}{2h} - \frac{J^2}{2h} \cos(2k) \quad . \quad (3.22)$$

Für  $k = 0$  erhält man die minimale Anregungsenergie bzw. die Energielücke

$$\Delta^{\text{1D,pol}} = 2h - 2J + \frac{J^2}{2h} - \frac{J^2}{2h} = 2h - 2J \quad . \quad (3.23)$$

Mit Hilfe dieser Resultate erschließen sich die Ergebnisse im Fall niedriger Magnetfelder problemlos.

### 3.1.3 Geordnete Phase

Die Ergebnisse der geordneten Phasen ergeben sich nach Gleichungen (3.7) sowie (3.21) bis (3.23) aus der Vertauschung von  $h$  und  $J$  zu

$$E_0^{\text{1D}} = -NJ - \frac{h^2}{4J} N \quad \text{bzw.} \quad e_0^{\text{1D}} = \frac{E_0}{N} = -J - \frac{h^2}{4J} \quad (3.24)$$

$$E_1^{\text{1D}}(k) = -NJ - \frac{h^2}{4J} N + 2J - 2h \cos k + \frac{h^2}{2J} - \frac{h^2}{2J} \cos(2k) \quad (3.25)$$

$$\omega^{\text{1D}}(k) = 2J - 2h \cos k + \frac{h^2}{2J} - \frac{h^2}{2J} \cos(2k) \quad (3.26)$$

$$\Delta^{\text{1D}} = 2J - 2h \quad . \quad (3.27)$$

Auffällig ist, dass die Energielücke (3.27) mit den exakten Resultaten aus [5], welche mit Hilfe der Jordan-Wigner Transformation errechnet wurden, übereinstimmt. Sie schließt bei  $h = J$ , welches dem Phasenübergang in einer Dimension entspricht. Dieselben Größen sollen nun für die geordnete Phase in höheren Dimensionen bestimmt werden.

## 3.2 Zwei und drei Dimensionen

Es wird nun ein Quadratgitter sowie ein kubisches Gitter in der geordneten Phase betrachtet, wobei die Berechnungen für das Quadratgitter etwas ausführlicher behandelt werden. Der erste angeregte Zustand entspricht in zwei Dimensionen im Teilchenbild einem 4-Teilchen-Zustand, da ein Spinflip gleich vier Pseudospins flippt. Dieser wird im Folgenden mit  $|4,q\rangle$  bezeichnet, wobei das  $q$  angibt, welche Plakette im Gitter angeregt ist. Der Grundzustand bzw. der 0-Teilchen-Zustand wird erneut mit  $|0\rangle$  bezeichnet. In den folgenden Rechnungen werden ebenfalls 6- und 8-Teilchen-Zustände auftauchen, die mit  $|6,q,p\rangle$  und  $|8,q,p\rangle$  bezeichnet werden. Beide Zustände entsprechen im ursprünglichen Teilchenbild einem 2-Teilchen-Zustand, wobei im Falle von  $|6,q,p\rangle$  die zwei Teilchen auf Nachbarplaketten  $q$  und  $p$  sitzen, während im Falle von  $|8,q,p\rangle$  die beiden Teilchen keine nächsten Nachbarn sind. Wie zuvor auch, wird als erstes die Grundzustandsenergie bestimmt.

### 3.2.1 Grundzustand

Ausgehend vom Hamiltonoperator (2.13) für  $d = 2$  erhält man für die Energie bis zur 1. Ordnung

$$E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \langle 0 | (PH_0P + PVP) | 0 \rangle = -2JN \quad . \quad (3.28)$$

Dies entspricht der Grundzustandsenergie des ungestörten Hamiltonians  $H_0$ , da die Energiekorrektur wie im eindimensionalen Fall in 1. Ordnung verschwindet.

In 2. Ordnung ergibt sich

$$\langle 0 | PT_{-4} \frac{h^2}{E_0^{(0)} - QH_0Q} QT_{+4} | 0 \rangle = \langle 0 | PT_{-4} \frac{h^2}{E_0^{(0)} - QH_0Q} Q \sum_{p=1}^N |4,p\rangle \quad (3.29)$$

$$= \langle 0 | PT_{-4} \left( -\frac{h^2}{8J} \right) \sum_{p=1}^N |4,p\rangle = -\frac{h^2}{8J} N \quad , \quad (3.30)$$

wobei die Operatoren  $T_0$ ,  $T_{-2}$ ,  $T_{+2}$  und  $T_{-4}$  auf  $|0\rangle$  angewandt Null ergeben, da keine Teilchen vorhanden sind, die sie vernichten können. Damit beträgt die gesamte Grundzustandsenergie bis zur 2. Ordnung

$$E_0^{2D} = -2JN - \frac{h^2}{8J} N \quad \text{bzw.} \quad e_0^{2D} = \frac{E_0}{N} = -2J - \frac{h^2}{8J} \quad . \quad (3.31)$$

Im Dreidimensionalen entspricht das System einem kubischen Gitter und ein Spinflip führt zu sechs Pseudospinflip, da ein Teilchen gleich sechs nächste Nachbarn hat. Die Anzahl der Pseudospins  $N_b$  beträgt das Dreifache der Anzahl  $N$  aller Gitterplätze. Die Anzahl aller Plaketten  $p$  ist wie in zwei Dimensionen identisch zu  $N$ .

Eine analoge Rechnung zum zweidimensionalen Fall mit dem Hamiltonoperator (2.13) und  $d = 3$  liefert das Ergebnis

$$E_0^{3D} = -3JN - \frac{\hbar^2}{12J}N \quad \text{bzw.} \quad e_0^{3D} = \frac{E_0}{N} = -3J - \frac{\hbar^2}{12J} \quad (3.32)$$

Als Nächstes folgt die Berechnung der Anregungsenergie.

### 3.2.2 Erster angeregter Zustand

Die Energie des ersten angeregten Zustands bis zur 1. Ordnung berechnet sich zu

$$E_4^{(0)} + E_4^{(1)} = E_4^{(0)} = -2JN + 8J \quad . \quad (3.33)$$

Auch hier verschwindet die Energiekorrektur in 1. Ordnung, denn der einzige Operator, der teilchenzahlerhaltend ist, ist  $T_0$  und dieser ergibt angewandt auf den Zustand  $|4,q\rangle$  Null, da er innerhalb einer Plakette zwei Teilchen vernichten und an den beiden freien Plätzen erzeugen will. Dies ist im ersten angeregten Zustand nicht möglich, da es keine Plakette gibt, die nur zur Hälfte besetzt ist.

In 2. Ordnung findet man

$$PVQ \frac{1}{E_4^{(0)} - QH_0Q} QVP |4,q\rangle \quad (3.34)$$

$$= \underbrace{P(T_{-2} + T_{+4} + T_{-4})Q}_{=:A} \frac{\hbar^2}{E_4^{(0)} - QH_0Q} Q(T_{+2} + T_{+4} + T_{-4}) |4,q\rangle \quad (3.35)$$

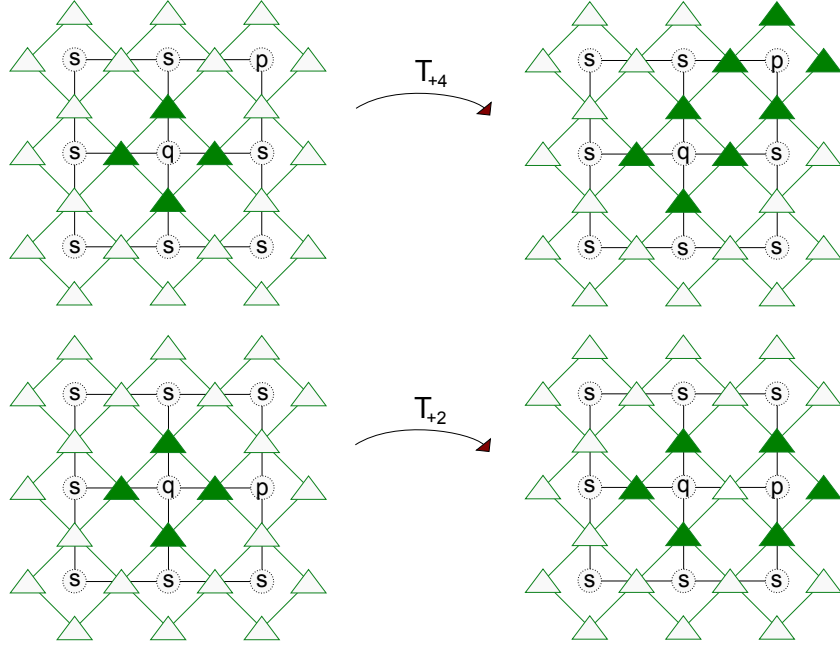
$$= A \frac{\hbar^2}{E_4^{(0)} - QH_0Q} Q \left( \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} |6,q,p\rangle + \sum_{\substack{p \neq q, \\ p \neq \text{n.N. von } q}} |8,q,p\rangle + |0\rangle \right) \quad (3.36)$$

$$= A \left( -\frac{\hbar^2}{4J} \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} |6,q,p\rangle - \frac{\hbar^2}{8J} \sum_{\substack{p \neq q, \\ p \neq \text{n.N. von } q}} |8,q,p\rangle + \frac{\hbar^2}{8J} |0\rangle \right) \quad (3.37)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{8J} (N+2) |4,q\rangle - \frac{\hbar^2}{8J} \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} |4,p\rangle \quad . \quad (3.38)$$

Dabei sind die möglichen Zustände, die sich ergeben, wenn man  $T_{+2}$  oder  $T_{+4}$  auf den 4-Teilchen-Zustand anwendet, in Abbildung 3.1 veranschaulicht.





**Abbildung 3.1:** Wirkung von  $T_{+2}$  und  $T_{+4}$  auf einen 4-Teilchen-Zustand.

$T_{-4} |4, q\rangle$  ergibt einfach den Vakuumzustand  $|0\rangle$ . Die Abkürzung n.N. steht für nächster Nachbar. In 2. Ordnung Störungstheorie des ersten angeregten Zustands ist das ursprüngliche Teilchen demnach in der Lage, auf einen Nachbarplatz zu hüpfen. Mit Hilfe der Fouriertransformation ergibt sich

$$E_4(\vec{k}) = -2JN - \frac{\hbar^2}{8J}N + 8J - \frac{\hbar^2}{4J}(1 + \cos k_1 + \cos k_2) \quad (3.39)$$

$$\omega^{2D}(\vec{k}) = 8J - \frac{\hbar^2}{4J}(1 + \cos k_1 + \cos k_2) \quad (3.40)$$

$$\Delta^{2D} = 8J - \frac{3\hbar^2}{4J} \quad . \quad (3.41)$$

In [9] konnten bei einer perturbativen Betrachtung des dreidimensionalen Ising-Modells bei tiefen Temperaturen dieselben Ergebnisse für die Grundzustandsenergie  $e_0$  sowie für die Anregungsenergie  $\Delta$  erzielt werden. Da dies äquivalent zu einem zweidimensionalen System mit einem kleinen transversalen Magnetfeld ist, lassen sich die hier durchgeführten Berechnungen in zwei Dimensionen verifizieren.

Auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter ergibt sich

$$E_6(\vec{k}) = -3JN - \frac{\hbar^2}{12J}N + 12J - \frac{\hbar^2}{12J}(1 + \cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3) \quad (3.42)$$

$$\omega^{3D}(\vec{k}) = 12J - \frac{\hbar^2}{12J}(1 + \cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3) \quad (3.43)$$

$$\Delta^{3D} = 12J - \frac{h^2}{3J} \quad , \quad (3.44)$$

wobei  $\vec{k}$  nun dem dreidimensionalen Impulsvektor entspricht. Auch in drei Dimensionen stimmen die Ergebnisse für  $e_0$  und  $\Delta$  mit [10] überein. Es sollen nun die bisher berechneten Größen auf beliebige Dimensionen  $d$  verallgemeinert werden.

### 3.3 Beliebige Dimensionen $d$

Auch für allgemeine Dimensionen  $d$  verschwindet die Energiekorrektur in 1. Ordnung für den Grundzustand sowie für den ersten angeregten Zustand. Basierend auf (2.13) beträgt die Grundzustandsenergie des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$

$$E_0^{(0)} = \langle 0 | P \left( -dJN + 2J \sum_{v=1}^{dN} n_v \right) | 0 \rangle = -dJN \quad . \quad (3.45)$$

Für die Energiekorrektur 2. Ordnung ergibt sich

$$E_0^{(2)} = \langle 0 | PT_{-2d}Q \frac{h^2}{E_0^{(0)} - QH_0Q} QT_{+2d} | 0 \rangle \quad (3.46)$$

$$= \langle 0 | PT_{-2d}Q \left( -\frac{h^2}{4dJ} \right) \sum_{p=1}^N | 2d, p \rangle = -\frac{h^2}{4dJ} N \quad . \quad (3.47)$$

Damit lautet die gesamte Grundzustandsenergie bis zur 2. Ordnung

$$E_0^{\text{dD}} = -dJN - \frac{h^2}{4dJ} N \quad \text{bzw.} \quad e_0^{\text{dD}} = \frac{E_0}{N} = -dJ - \frac{h^2}{4dJ} \quad . \quad (3.48)$$

Die ungestörte Energie des ersten angeregten Zustands beträgt

$$E_{2d}^{(0)} = \langle 2d, q | P \left( -dJN + 2J \sum_{v=1}^{dN} n_v \right) | 2d, q \rangle = -dJN + 4dJ \quad (3.49)$$

Die Rechnung für die Energiekorrektur in 2. Ordnung des ersten angeregten Zustands liefert

$$P \left( \sum_{i=-d}^d T_{2i} \right) Q \frac{h^2}{E_{2d}^{(0)} - QH_0Q} Q \left( \sum_{i=-d}^d T_{2i} \right) P | 2d, q \rangle \quad (3.50)$$

$$= \underbrace{P (T_{-2d+2} + T_{+2d} + T_{-2d}) Q}_{=:A} \frac{h^2}{E_{2d}^{(0)} - QH_0Q} Q (T_{+2d-2} + T_{+2d} + T_{-2d}) | 2d, q \rangle \quad (3.51)$$

$$= A \frac{h^2}{E_{2d}^{(0)} - QH_0Q} \left( \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} | 4d - 2, q, p \rangle + \sum_{\substack{p \neq q, \\ p \neq \text{n.N. von } q}} | 4d, q, p \rangle + | 0 \rangle \right) \quad (3.52)$$

$$= A \left( -\frac{\hbar^2}{4J(d-1)} \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} |4d-2, q, p\rangle - \frac{\hbar^2}{4dJ} \sum_{\substack{p \neq q, \\ p=\text{n.N. von } q}} |4d, q, p\rangle + \frac{\hbar^2}{4dJ} |0\rangle \right) \quad (3.53)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4dJ} N |2d, q\rangle - \frac{\hbar^2}{2dJ(d-1)} |2d, q\rangle - \frac{\hbar^2}{4dJ(d-1)} \sum_{\substack{p=\text{n.N.} \\ \text{von } q}} |2d, p\rangle \quad . \quad (3.54)$$

In beliebigen Dimensionen sind demnach weiterhin Sprünge zu nächsten Nachbarplätzen möglich. Nach der Fouriertransformation erhält man

$$E_{2d}(\vec{k}) = -dJN - \frac{\hbar^2}{4dJ} N + 4dJ - \frac{\hbar^2}{2dJ(d-1)} \left( 1 + \sum_{i=1}^d \cos k_i \right) \quad (3.55)$$

$$\omega^{\text{dD}}(\vec{k}) = 4dJ - \frac{\hbar^2}{2dJ(d-1)} \left( 1 + \sum_{i=1}^d \cos k_i \right) \quad (3.56)$$

$$\Delta^{\text{dD}} = 4dJ - \frac{\hbar^2(d+1)}{2dJ(d-1)} \quad (3.57)$$

mit dem  $d$ -dimensionalen Impulsvektor  $\vec{k} = (k_1, \dots, k_d)$ .

Um die Störungsrechnung abzuschließen, wird nun noch der Grenzwert  $d \rightarrow \infty$  für die Grundzustandsenergie  $e_0$  sowie für die Energielücke  $\Delta$  betrachtet. Um ein sinnvolles Ergebnis zu erhalten, wird die Kopplung  $J$  durch  $J/d$  ersetzt, um zu vermeiden, dass die Anzahl der Kopplungen extensiv mit der Dimension steigt. Man bekommt

$$\lim_{d \rightarrow \infty} e_0 = \lim_{d \rightarrow \infty} \left( -J - \frac{\hbar^2}{4J} \right) = -J - \frac{\hbar^2}{4J}, \quad (3.58)$$

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \Delta = \lim_{d \rightarrow \infty} \left( 4J - \frac{\hbar^2(d+1)}{2J(d-1)} \right) = 4J - \frac{\hbar^2}{2J} \quad . \quad (3.59)$$

Die Tabelle 3.1 stellt die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie und die Energielücke für die polarisierte ( $\hbar \gg J$ ) und die geordnete Phase ( $\hbar \ll J$ ) für  $d \rightarrow \infty$  gegenüber. Die Resultate für die polarisierte Phase sind der Bachelorarbeit [7] entnommen.

	$\hbar \ll J$	$\hbar \gg J$
Grundzustandsenergie $e_0$	$-J - \frac{\hbar^2}{4J}$	$-h$
Energielücke $\Delta$	$4J - \frac{\hbar^2}{2J}$	$2h - 2J$

**Tabelle 3.1:** Vergleich der Grundzustandsenergie  $e_0$  und der Energielücke  $\Delta$  für hohe und niedrige Magnetfelder  $h$  im Limes  $d \rightarrow \infty$ .

Man stellt fest, dass die Energielücke in den beiden Grenzfällen nicht am selben Punkt schließt. Daher wird im nächsten Kapitel die Grundzustands- und die Anregungsenergie analytisch für  $d = \infty$  bestimmt.

# 4 Molekularfeld- und Spinwellentheorie in $d = \infty$

Die bisherigen Ergebnisse aus der störungstheoretischen Betrachtung der geordneten Phase lassen keine Schlussfolgerung auf den Phasenübergang zwischen geordneter und polarisierter Phase zu. Um die Lage des kritischen Punktes in unendlich hohen Dimensionen zu erhalten, müssen die im letzten Kapitel betrachteten Energien nicht nur für die Grenzfälle hoher und niedriger Magnetfelder, sondern für alle Verhältnisse  $h/J$  bekannt sein. Daher wird zunächst die Grundzustandsenergie analytisch mit Hilfe der Molekularfeldtheorie bestimmt.

## 4.1 Exakte Grundzustandsenergie

Die Molekularfeldtheorie geht davon, dass jeder Platz im Gitter dasselbe äußere Feld spürt und daher alle Plätze gleich behandelt werden können. Es kann gezeigt werden, dass für  $d = \infty$ , d.h. wenn jedes Teilchen unendlich viele Nachbarn besitzt, dieser Ansatz das Problem sogar exakt beschreibt [1, 11].

Alle weiteren Betrachtungen, die jetzt folgen, beziehen sich daher auf den Fall  $d = \infty$ . Ist die exakte Grundzustandsenergie gefunden, lässt sich daraus auf die Lage des kritischen Punktes, an dem der Phasenübergang stattfindet, schließen. Zur Berechnung der Grundzustandsenergie wird mit Hilfe eines Produktwellenansatzes

$$|\Psi_0\rangle = \prod_j \left( \cos \alpha |\uparrow\rangle_j + \sin \alpha |\downarrow\rangle_j \right) \quad (4.1)$$

für den Grundzustand der Erwartungswert  $E_0(\alpha) = \langle \Psi_0 | H^{dD} | \Psi_0 \rangle$  des  $d$ -dimensionalen Hamiltonians (2.1), wobei  $J$  durch  $J/d$  ersetzt werden muss, berechnet und in Abhängigkeit von  $\alpha$  minimiert. Für ein festes  $i$  und  $n$  ergibt sich zunächst

$$\langle \Psi_0 | h\sigma_i^z - \frac{J}{d}\sigma_i^x\sigma_{i+n}^x | \Psi_0 \rangle \quad (4.2)$$

$$= \prod_j \left( \cos \alpha \langle \uparrow |_j + \sin \alpha \langle \downarrow |_j \right) \left( h\sigma_i^z - \frac{J}{d}\sigma_i^x\sigma_{i+n}^x \right) \prod_j \left( \cos \alpha |\uparrow\rangle_j + \sin \alpha |\downarrow\rangle_j \right) \quad (4.3)$$

$$= h (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) - \frac{J}{d} (2 \cos \alpha \sin \alpha)^2 = h \cos 2\alpha - \frac{J}{d} \sin^2 2\alpha \quad . \quad (4.4)$$

Insgesamt gilt daher für die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von  $\alpha$

$$E_0(\alpha) = h \cos 2\alpha \cdot N - \frac{J}{d} \sin^2 2\alpha \cdot dN = N(h \cos 2\alpha - J \sin^2 2\alpha) \quad . \quad (4.5)$$

Mit Hilfe der ersten Ableitung von  $E_0(\alpha)$  ergeben sich die Extremstellen

$$\alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = \pm \frac{\pi}{2}, \quad \alpha_3 = \pm \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right), \quad (4.6)$$

wobei  $-1 < -\frac{h}{2J} < 1$  gilt auf Grund des Definitionsbereichs des Arcuscosinus. Da  $-\frac{h}{2J}$  wegen  $h > 0$  und  $J > 0$  nicht positiv werden kann, ist  $\alpha_3$  nur für  $h < 2J$  definiert. Die Untersuchung mit Hilfe der zweiten Ableitung von  $E_0(\alpha)$  liefert die Ergebnisse

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} E_0(\alpha_1 = 0) < 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Maximum} \quad (4.7)$$

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} E_0(\alpha_2 = \pm \frac{\pi}{2}) \begin{cases} > 0 & \text{für } h > 2J \\ < 0 & \text{für } h < 2J \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{Minimum} \\ \text{Maximum} \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} E_0\left(\alpha_3 = \pm \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right)\right) > 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Minimum} \quad (4.9)$$

Zusammenfassend gelangt man zu folgender Erkenntnis: falls  $h > 2J$  ist, dann hat  $E_0$  an der Stelle  $\alpha_{\text{pol.}} = \pm \frac{\pi}{2}$  ein Minimum, und falls  $h < 2J$  ist, dann besitzt  $E_0$  ein Minimum an der Stelle  $\alpha_{\text{geordnet}} = \pm \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right)$ . Demnach findet bei

$$\left(\frac{h}{J}\right)_c = 2 \quad (4.10)$$

ein Phasenübergang statt. Anschaulich bedeuten die Ergebnisse, dass bei kleinen Magnetfeldern  $h$  auf allen Plätzen Überlagerungen von  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  gemäß (4.1) mit  $\alpha_3$  aus (4.6) auftreten, bis  $h$  den Wert  $2J$  erreicht. Ab dann existiert der Grundzustand  $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$ , welcher sich für noch größere Magnetfelder wegen  $\alpha = \text{const.} = \pm \frac{\pi}{2}$  nicht mehr verändert.

Die Berechnung ist demnach konsistent mit dem Grundzustand im Grenzfall  $h \gg J$ , doch auch mit dem in dieser Arbeit näher betrachteten Grenzfall  $h \ll J$  stimmt das Ergebnis überein, denn es gilt

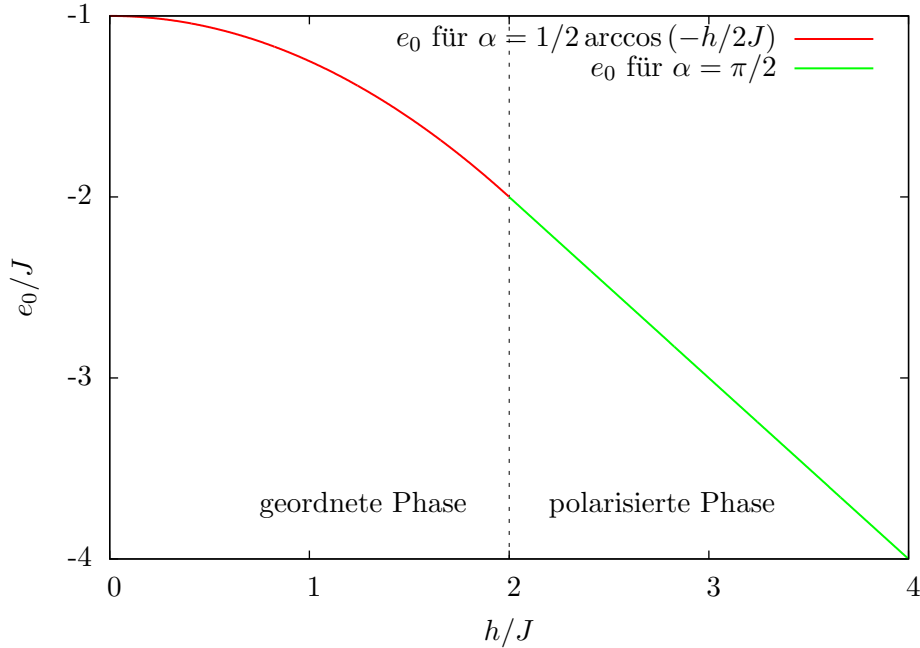
$$\lim_{\frac{h}{J} \rightarrow 0} \alpha_3 = \lim_{\frac{h}{J} \rightarrow 0} \left(\pm \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right)\right) = \pm \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi}{2} = \pm \frac{\pi}{4}, \quad (4.11)$$

was für den Grundzustand  $|\Psi_0\rangle$  eine Überlagerung von  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  auf jedem Platz mit dem Vorfaktor  $\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}$  bedeuten würde, was gerade den Zuständen  $|\leftarrow\leftarrow \dots \leftarrow\rangle$  oder  $|\rightarrow\rightarrow \dots \rightarrow\rangle$  entspricht.

Der Phasenübergang soll nun weiter hinsichtlich seiner Ordnung untersucht werden.

## 4.2 Ordnung des Phasenübergangs

Es konnte bereits gezeigt werden, dass der kritische Punkt bei  $h/J = 2$  zu finden ist. Um die Ordnung des Phasenübergangs am kritischen Punkt zu ermitteln, werden die



**Abbildung 4.1:** Darstellung der Grundzustandsenergie  $e_0$  pro Platz in Abhängigkeit von  $h/J$  für den Grenzfall  $d = \infty$ . Im Bereich  $0 < h/J < 2$  existiert die geordnete Phase, während sich für  $h/J > 2$  die polarisierte Phase einstellt. Die Energien der zwei Phasen gehen am kritischen Punkt stetig ineinander über.

Ableitungen der Energie  $E_0(\alpha)$  bestimmt. Es handelt sich dann um einen Phasenübergang  $n$ -ter Ordnung, wenn in der  $n$ -ten Ableitung der Energie zum ersten Mal ein Sprung am kritischen Punkt stattfindet.

Mit  $x := h/J$  lautet die Energie in Einheiten von  $J$

$$\frac{E_0}{NJ} = \frac{e_0}{J} = x \cos 2\alpha - \sin^2 2\alpha \quad . \quad (4.12)$$

Daher ergibt sich jeweils für die polarisierte und geordnete Phase

$$\frac{e_0}{J} = -\frac{x^2}{4} - 1 \quad , \quad \text{für } x < 2 \quad (4.13)$$

$$\frac{e_0}{J} = -x \quad , \quad \text{für } x > 2 \quad . \quad (4.14)$$

Ein Vergleich mit Tabelle 3.1 liefert die Erkenntnis, dass die exakt berechnete Grundzustandsenergie gerade mit den perturbativ berechneten Grundzustandsenergien bis zur 2. Ordnung im Limes  $d \rightarrow \infty$  übereinstimmt. Abbildung 4.1 zeigt die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von  $x = h/J$ .

Für die erste Ableitung gilt

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{e_0}{J} \right) = -\frac{x}{2} \quad , \text{ für } x < 2 \quad , \quad (4.15)$$

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{e_0}{J} \right) = -1 \quad , \text{ für } x > 2 \quad . \quad (4.16)$$

Betrachtet man den Grenzwert  $x \rightarrow 2$ , ist schnell ersichtlich, dass die erste Ableitung bei  $x = 2$  stetig ist. Da die zweiten Ableitungen

$$\frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{e_0}{J} \right) = -\frac{1}{2} \quad , \text{ für } x < 2 \quad , \quad (4.17)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \left( \frac{e_0}{J} \right) = 0 \quad , \text{ für } x > 2 \quad (4.18)$$

am kritischen Punkt offensichtlich nicht mehr stetig sind, handelt es sich um einen Phasenübergang 2. Ordnung. Es wird nun noch der kritische Exponent der Magnetisierung am Phasenübergang bestimmt werden.

### 4.3 Magnetisierung und kritischer Exponent

Über die Magnetisierung der zwei Phasen lässt sich der Ordnungsparameter bestimmen. Dazu wird wiederum auf die Molekularfeldnäherung zurückgegriffen, sodass sich die Magnetisierung pro Platz in x- und z-Richtung mit Hilfe von

$$M_i^{x/z} = \langle \sigma_i^{x/z} \rangle = \langle \Psi_0^{(i)} | \sigma_i^{x/z} | \Psi_0^{(i)} \rangle \quad (4.19)$$

berechnen lässt. Die zwei unterschiedlichen Wellenfunktionen werden, basierend auf (4.1) und mit  $\alpha_{\text{pol.}} = \pm \frac{\pi}{2}$  und  $\alpha_{\text{geordnet}} = \pm \frac{1}{2} \arccos \left( -\frac{x}{2} \right)$  zu

$$|\Psi_0^{(i)}\rangle = \sqrt{\frac{2-x}{2}} |\uparrow\rangle_i \pm \sqrt{\frac{2+x}{2}} |\downarrow\rangle_i \quad , \text{ für } x < 2 \quad (4.20)$$

$$|\Psi_0^{(i)}\rangle = \pm |\downarrow\rangle_i \quad , \text{ für } x > 2 \quad (4.21)$$

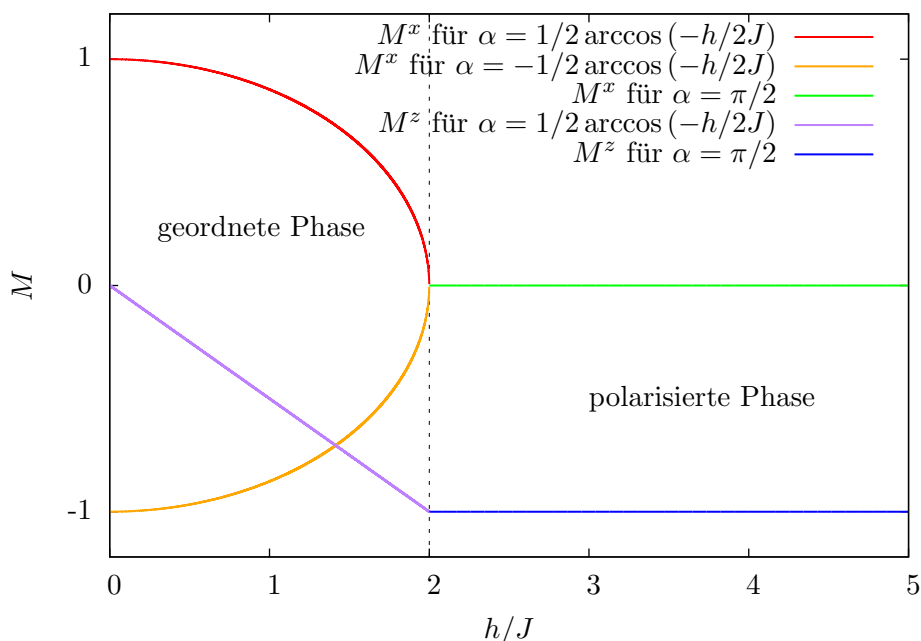
bestimmt. Gemäß (4.19) beträgt die Magnetisierung in x- und z-Richtung

$$\left. \begin{aligned} M_i^x &= \pm \frac{\sqrt{4-x^2}}{2} \\ M_i^z &= -\frac{x}{2} \end{aligned} \right\} \quad \text{für } x < 2 \quad (4.22)$$

$$\left. \begin{aligned} M_i^x &= 0 \\ M_i^z &= -1 \end{aligned} \right\} \quad \text{für } x > 2 \quad (4.23)$$

Abbildung 4.2 stellt die Magnetisierung grafisch dar.

Die polarisierte Phase ( $h/J > 2$ ) wird deshalb so genannt, da sich dort alle Spins entlang des Magnetfeldes ausrichten. Im Bereich  $0 < h/J < 2$  existiert die geordnete



**Abbildung 4.2:** Veranschaulichung der Magnetisierung in  $x$ - und  $z$ -Richtung in Abhängigkeit von  $h/J$ . In der polarisierten Phase, d.h. für  $h/J > 2$ , verschwindet die Magnetisierung in  $x$ -Richtung, während die Magnetisierung in  $z$ -Richtung betragsmäßig maximal wird. Für sehr niedrige Magnetfelder  $h \ll J$  wird  $|M^x|$  maximal und  $M^z$  verschwindet.

Phase, die auch Symmetrie-gebrochene Phase heißt, da hier die Symmetrie des Hamiltonoperators gebrochen wird. Der Grundzustand ist zweifach entartet, da die Spins beim Ferromagneten entweder alle nach rechts oder alle nach links zeigen können und dies energetisch keinen Unterschied macht. Wenn das System sich für einen dieser beiden Grundzustände entschieden hat und sich damit entweder die Magnetisierung 1 oder -1 einstellt, würde es Fluktuationen unendlicher Längenskala erfordern, um in den anderen Grundzustand zu gelangen, da jeder Spin einzeln geflippt werden müsste. Daher bleibt das System in diesem einen Zustand und bricht die Symmetrie des Hamiltonians.

Der kritische Exponent lässt sich nun anhand des Verhaltens von  $M_i^x$  am Phasenübergang  $x = 2$  berechnen. Dazu wird  $x$  durch  $(2 - \epsilon)$  ersetzt und geschaut, wie sich die Magnetisierung für  $\epsilon \ll 1$  verhält.

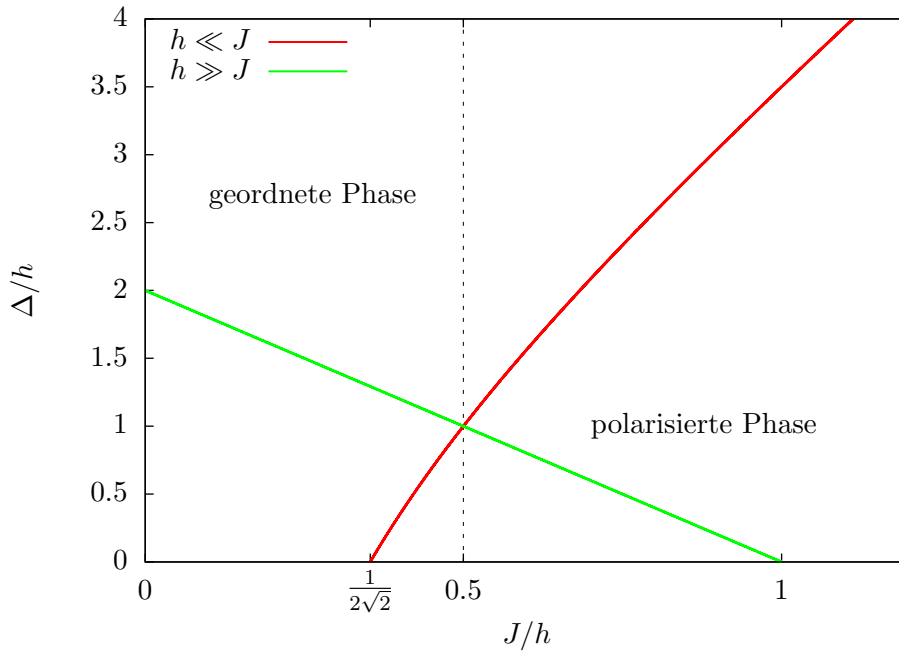
$$\langle \sigma_i^x \rangle = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4 - (2 - \epsilon)^2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\epsilon - \epsilon^2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4\epsilon} \quad , \text{ für } \epsilon \ll 1 \quad (4.24)$$

$$= \pm \epsilon^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (4.25)$$

Der kritische Exponent ist damit

$$\beta = \frac{1}{2} \quad (4.26)$$





**Abbildung 4.3:** Darstellung der perturbativ berechneten Energielücke in den Grenzfällen  $h \ll J$  und  $h \gg J$ . Die Energielücke für den Fall großer Magnetfelder (grün) schließt bei  $J/h = 1$ , während die Energielücke im Grenzfall sehr niedriger Magnetfelder (rot) bei  $J/h = 1/(2\sqrt{2})$  auf Null abfällt. Der exakte kritische Punkt liegt zwischen den beiden Werten.

und entspricht daher dem typischen Ordnungsparameter, der sich für ausreichend hohe Dimensionen aus der Molekularfeldtheorie ergibt.

#### 4.4 Exakte Energielücke

Bisher konnte die Anregungsenergie nur perturbativ aus den zwei Grenzfällen hoher und niedriger Magnetfelder  $h$  bestimmt werden. Diese wurde in der Tabelle 3.1 im Limes  $d \rightarrow \infty$  festgehalten. Abbildung 4.3 stellt die beiden Grenzfälle in Einheiten von  $h$  dar.

Die Anregungsenergie fällt in den beiden Grenzfällen nicht an der gleichen Stelle auf Null ab, was ja auch nicht zu erwarten war, da die Energielücke nur störungstheoretisch betrachtet wurde. Die exakte Anregungsenergie sollte am Phasenübergang  $J/h = 1/2$  auf Null absinken und danach wieder steigen, was bedeutet, dass an dieser Stelle keine Energie nötig ist, um in den angeregten Zustand überzugehen, d.h.  $\Delta = 0$ . Es soll nun seitens hoher Magnetfelder  $h$  die Anregungsenergie bis zum Phasenübergang exakt bestimmt werden.

Dies wird mit Hilfe der Spinwellentheorie realisiert. Dazu werden die Paulimatrizen des Hamiltonoperators (2.1), wobei  $J$  erneut durch  $J/d$  substituiert werden muss, zunächst

durch die Spinoperatoren  $S^z$  und  $S^x$  ersetzt, welche dieselbe Wirkung auf die Spins haben mit dem Unterschied, dass sie die Eigenwerte  $\pm 1/2$  besitzen. Der Hamiltonoperator lässt sich damit umschreiben zu

$$H = 2h \sum_j S_j^z - \frac{4J}{d} \sum_{j,n} S_j^x S_{j+n}^x \quad . \quad (4.27)$$

Die Spinoperatoren werden dann durch bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ersetzt. Diese lauten für  $S = 1/2$

$$S_j^z = a_j^\dagger a_j - S = n_j - \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad S_j^x = \frac{1}{2}(S_j^+ + S_j^-) \quad (4.28)$$

$$\text{mit} \quad S_j^+ = \sqrt{2S - a_j^\dagger a_j} a_j = \sqrt{1 - n_j} a_j \quad (4.29)$$

$$\text{und} \quad S_j^- = a_j^\dagger \sqrt{2S - a_j^\dagger a_j} = a_j^\dagger \sqrt{1 - n_j} \quad , \quad (4.30)$$

wobei  $a^\dagger$  und  $a$  die bekannten bosonischen Kommutatorrelationen erfüllen:

$$\left[ a_i, a_j^\dagger \right] = \delta_{i,j} \quad , \quad \left[ a_i, a_j \right] = 0 \quad , \quad \left[ a_i^\dagger, a_j^\dagger \right] = 0 \quad . \quad (4.31)$$

Für  $d = \infty$  verschwindet der Erwartungswert des Anzahloperators  $n_i$  [1]. Daher können die Näherungen

$$S_j^+ \approx a_j \quad (4.32)$$

$$S_j^- \approx a_j^\dagger \quad (4.33)$$

getroffen werden. Für den Hamiltonian ergibt sich nun

$$H = -Nh + 2h \sum_j n_j - \frac{J}{d} \sum_{j,n} \left( a_j a_{j+n} + a_j^\dagger a_{j+n}^\dagger + a_j a_{j+n}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+n} \right) \quad . \quad (4.34)$$

Mit Hilfe einer Fouriertransformation der Form

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} a_k \quad (4.35)$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} a_k^\dagger \quad (4.36)$$

wird in den Impulsraum gewechselt. Der Hamiltonoperator transformiert sich damit zu

$$H = -Nh + \sum_k A_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \frac{B_k}{2} (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \quad (4.37)$$

$$\text{mit} \quad A_k = 2h - \frac{2J}{d} \sum_i \cos k_i \quad (4.38)$$

$$\text{und} \quad \frac{B_k}{2} = -\frac{J}{d} \sum_i \cos k_i \quad . \quad (4.39)$$

Ziel ist es, den Hamiltonoperator zu diagonalisieren. Dazu wird die sogenannte Bogoliubov-Transformation durchgeführt [12], welche die Operatoren  $a$  und  $a^\dagger$  durch andere bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $b$  und  $b^\dagger$  ersetzt

$$a_k = \cosh(\alpha_k) b_k + \sinh(\alpha_k) b_{-k}^\dagger \quad (4.40)$$

$$a_k^\dagger = \cosh(\alpha_k) b_k^\dagger + \sinh(\alpha_k) b_{-k} \quad . \quad (4.41)$$

Damit der Hamiltonian diagonal wird und damit nur gleiche Moden  $k$  koppelt, müssen alle Terme mit unterschiedlichen Indizes ( $-k$  und  $k$ ) verschwinden. Fasst man diese Terme zusammen, muss der Vorfaktor dieser Terme gleich Null sein. Aus dieser Bedingung ergibt sich der Winkel

$$\alpha_k = \frac{1}{2} \operatorname{arctanh}\left(-\frac{B_k}{A_k}\right) \quad . \quad (4.42)$$

Der diagonale Hamiltonoperator lässt sich unter Benutzung der Vertauschungsrelationen (4.31) sowie den Beziehungen

$$\sinh(2\alpha_k) = \sinh\left(\operatorname{arctanh}\left(-\frac{B_k}{A_k}\right)\right) = \frac{-B_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}} =: \frac{-B_k}{\Omega_k} \quad (4.43)$$

$$\cosh(2\alpha_k) = \cosh\left(\operatorname{arctanh}\left(-\frac{B_k}{A_k}\right)\right) = \frac{A_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}} =: \frac{A_k}{\Omega_k} \quad (4.44)$$

schreiben als

$$H = -Nh + \frac{1}{2} \sum_k (\Omega_k - A_k) + \sum_k \Omega_k b_k^\dagger b_k \quad . \quad (4.45)$$

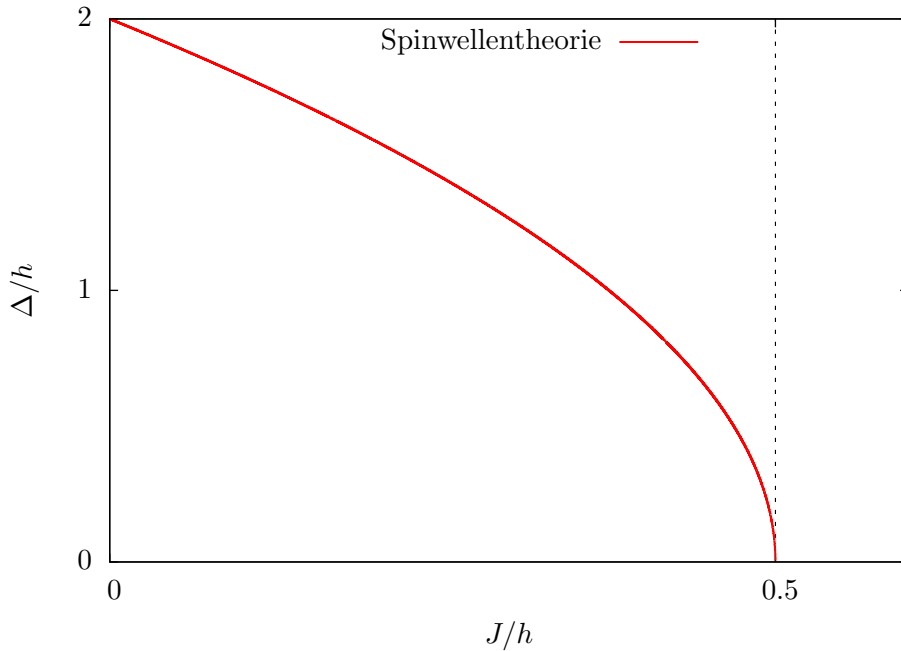
Der Term  $\frac{1}{2} \sum_k (\Omega_k - A_k)$  stellt eine Energiekorrektur zum Grundzustand dar und ist, da über alle auftretenden  $k$  summiert wird,  $k$ -unabhängig. Die Dispersionsrelation lautet

$$\Omega_k = \sqrt{A_k^2 - B_k^2} = \sqrt{4h^2 - \frac{8hJ}{d} \sum_{i=1}^d \cos k_i} \quad . \quad (4.46)$$

Für  $\vec{k} = \vec{0}$  ergibt sich die Energielücke

$$\Delta = \sqrt{4h^2 - \frac{8hJd}{d}} = 2h\sqrt{1 - 2\frac{J}{h}} \quad (4.47)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\Delta}{h} = 2\sqrt{1 - 2\frac{J}{h}} \quad . \quad (4.48)$$



**Abbildung 4.4:** Verlauf der berechneten Energielücke mit Hilfe der Spinwellentheorie. Diese schließt im zuvor ermittelten kritischen Punkt  $J/h = 1/2$ .

Das Ergebnis stimmt mit dem zuvor berechneten Phasenübergang bei  $J/h = 1/2$  überein, denn an dieser Stelle fällt die gemäß der Spinwellentheorie berechnete Energielücke auf Null ab.

Entwickelt man das Ergebnis (4.48) in Ordnungen von  $J/h$ , sollte es bis zur ersten Ordnung mit der perturbativ berechneten Energielücke für den Grenzfall  $h \gg J$  aus Tabelle 3.1 übereinstimmen. Da für die exakte Darstellung einer Wurzelfunktion ein Polynom unendlichen Grades benötigt wird, wird die Energielücke (4.48) quadriert, sodass lediglich ein Polynom ersten Grades übrig bleibt. Quadriert man nun ebenfalls die störungstheoretisch berechnete Energielücke aus Tabelle 3.1, sollte diese bereits in der ersten Ordnung ein exaktes Ergebnis liefern. Die Resultate

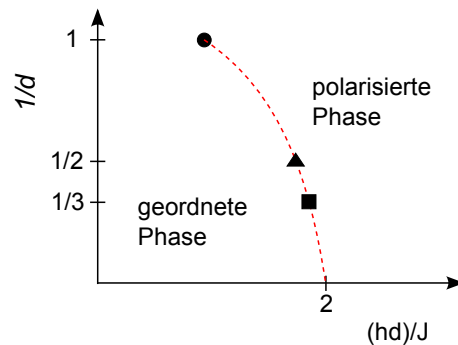
$$\left(\frac{\Delta}{h}\right)_{\text{Spinwellen}}^2 = 4 \left(1 - 2\frac{J}{h}\right) = 4 - 8\frac{J}{h} \quad (4.49)$$

$$\left(\frac{\Delta}{h}\right)_{h \gg J}^2 = \left(2 - 2\frac{J}{h}\right)^2 = 4 - 8\frac{J}{h} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{J}{h}\right)^2\right) \quad (4.50)$$

zeigen, dass genau dies der Fall ist und die quadrierte perturbativ berechnete Energielücke ebenfalls am kritischen Punkt  $J/h = 1/2$  schließt. Insbesondere wird hier deutlich, dass das Teilchenbild der polarisierten Phase für beliebige Dimensionen  $d$  seine Gültigkeit hat.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Zu Beginn der Arbeit wurde das Ising-Modell im transversalen Magnetfeld erläutert und betont, dass das Modell zwei Phasen besitzt, nämlich die geordnete Phase, die sich im Grenzfall  $h \ll J$  einstellt, und die polarisierte Phase, welche für  $h \gg J$  existiert. Da die Natur der elementaren Anregungen der zwei Phasen sich als unterschiedlich erwies, wurden zwei verschiedene Teilchenbilder eingeführt, um die Anregungen zu beschreiben. Der Grundzustand entsprach in beiden Phasen einem 0-Teilchen-Zustand. Der erste angeregte Zustand der polarisierten Phase konnte verstanden werden als ein 1-Teilchen-Zustand, während die niedrigste Anregung der geordneten Phase in allgemeinen Dimensionen  $d > 1$  einem  $2d$ -Teilchen-Zustand entsprach. Danach wurde für die geordnete Phase die Grundzustands- und Anregungsenergie störungstheoretisch bis zur 2. Ordnung in einer Dimension sowie in zwei, drei und beliebigen Dimensionen  $d$  berechnet. Dabei musste zur Berechnung der Dispersion der effektive Hamiltonoperator zunächst bzgl. der  $2d$ -Teilchen-Zustände mittels Fouriertransformation diagonalisiert werden. Da mit Hilfe der Ergebnisse der Störungsrechnung keine Rückschlüsse auf einen Phasenübergang gezogen werden konnten, wurde im zweiten Teil dieser Bachelorarbeit eine analytische Berechnung der Grundzustandsenergie mittels Molekularfeldtheorie sowie der Energielücke, basierend auf der Spinwellentheorie, in  $d = \infty$  durchgeführt. Die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie lieferten einen Phasenübergang 2. Ordnung bei  $h/J = 2$ , der im Limes  $d = \infty$  die Physik exakt beschreibt. Die Berechnung der Energielücke durch die Spinwellentheorie seitens hoher Magnetfelder  $h$  bestätigten einen Phasenübergang bei  $h/J = 2$ . Die Resultate haben gezeigt, dass es sinnvoll sein kann, die Physik in unendlich hohen Dimensionen zu betrachten, da die Ergebnisse in zwei, drei und  $d = \infty$  Dimensionen für dieses Modell recht nah beieinander liegen (Abbildung 5.1).



**Abbildung 5.1:** Skizze des kritischen Punktes in Abhängigkeit der inversen Dimension  $1/d$ .

Basierend auf der Molekularfeldtheorie wäre eine analytische Spinwellenrechnung der Energielücke im Bereich  $h < 2J$  interessant. Da der Grundzustand in der geordneten Phase allerdings nicht mehr trivial  $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$  ist, sondern vom Verhältnis  $h/J$  abhängt und durch einen Überlagerungszustand beschrieben wird, müsste mit Hilfe einer geeigneten Transformationsmatrix das Koordinatensystem so gedreht werden, dass der von  $h/J$  abhängige Grundzustand auf einen der beiden Eigenzustände  $|\rightarrow\rightarrow \dots \rightarrow\rangle$  und  $|\leftarrow\leftarrow \dots \leftarrow\rangle$  von  $\sigma^x$  abgebildet wird. Die Berechnung wäre demnach aufwändiger, sollte aber auf denselben kritischen Punkt bei  $h/J = 2$  führen.

# Literaturverzeichnis

- [1] D. G. Joshi, K. Coester, K. P. Schmidt, and M. Vojta. Non-linear bond-operator theory and  $1/d$  expansion for coupled-dimer magnets I: Paramagnetic phase. 2014, to be published.
- [2] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, **31**: 253, 1925.
- [3] L. Onsager. Crystal statistics I. A two dimensional model with order-disorder transition. *Physical Review*, **65**: 117, 1944.
- [4] B. K. Chakrabarti, A. Dutta, and P. Sen. *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*. Springer, 1996.
- [5] P. Pfeuty. The One-Dimensional Ising Model with a Transverse Field. *Annals of Physics*, **57**: 79, 1970.
- [6] Henk W. J. Blöte and Y. Deng. Cluster Monte Carlo simulation of the transverse Ising model. *Physical Review E*, **66**: 066110, 2002.
- [7] J. Hüdepohl. Physik der polarisierten Phase des Ising-Modells im transversalen Feld in beliebigen Dimensionen. TU Dortmund. 2014.
- [8] Kai P. Schmidt. *Festkörpertheorie II*. Vorlesungsskript. TU Dortmund. 2008/2009.
- [9] J. Oitmaa, C. J. Hamer, and Zheng Weihong. Low-temperature series expansion for the  $(2+1)$ -dimensional Ising model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **24**: 2863, 1991.
- [10] Zheng Weihong, J. Oitmaa, and Hamer C. J. Series expansions for the 3D transverse Ising Model at  $T=0$ . *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**: 5425, 1994.
- [11] M. Vojta. Private communication.
- [12] D. Ixert. Klassischer Limes und Spinwellentheorie für die Mottphase des Hubbardmodells auf dem Dreiecksgitter. TU Dortmund. 2010.

## **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich allen meinen Dank aussprechen, die mich während meiner Bearbeitungszeit unterstützt haben und mir bei Fragen zur Seite standen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Kai P. Schmidt, Kris Cöster und Michael Powalski für die Bereitstellung des interessanten Themas sowie die ausgiebige und sehr angenehme Betreuung.

Außerdem möchte ich meinen Eltern danken, die meine Arbeit korrekturgelesen haben und auf deren ständige Unterstützung ich jederzeit zählen konnte.

## Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel "Pseudo-Spin Anregungen des Ising-Modells im transversalen Magnetfeld auf dem hyperkubischen Gitter" selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

### Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift