

Physik der polarisierten Phase des Ising-Modells im transversalen Feld in beliebigen Dimensionen

Bachelorarbeit
zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

vorgelegt von
Jan Hüdepohl
geboren in Lünen

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

Ein wesentlicher Aspekt der theoretischen Festkörperphysik ist die Untersuchung von Phasenübergängen. Diese Arbeit beschäftigt sich mit dem Ising-Modell mit ferromagnetischer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung und transversalem Magnetfeld auf dem hyperkubischen Gitter bei Temperatur $T = 0$. Hier existieren je nach Verhältnis von Kopplung J und Magnetfeld h zwei verschiedene Phasen mit unterschiedlichen Grundzustandsentartungen.

Es werden perturbative Untersuchungen in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie der Grundzustands- und Anregungsenergie in der polarisierten Phase ($h \gg J$) für beliebige Dimensionen D angestellt. Weiterhin werden Grundzustandsenergie und Energielücke für den Grenzfall $D = \infty$ analytisch bestimmt. Es zeigt sich ein Phasenübergang zweiter Ordnung, welcher im Grenzfall unendlicher Dimensionen bei $h = 2J$ liegt, was durch eine Molekularfeldrechnung gezeigt wird. Interessanterweise ist das Teilchenbild der perturbativen Rechnung in J/h konsistent mit einer linearen Spinwellenrechnung, sodass die Energielücke in beiden Rechnungen im Grenzfall $D \rightarrow \infty$ schließt. Durch eine Entwicklung in J/h lässt sich das Ergebnis der Spinwellenrechnung in das perturbative Ergebnis überführen.

Abstract

An important aspect of theoretical solid-state physics is the research on phase transitions. This thesis deals with the Ising model with ferromagnetic nearest-neighbour interactions in the presence of a transverse magnetic field on a hypercubic lattice at $T = 0$. Depending on the ratio between Ising exchange J and magnetic field h there exist two physical phases with different degeneracies.

Here, first and second order perturbation theory is performed for the ground-state energy and the dispersion of the elementary excitation in the polarized phase ($h \gg J$) for arbitrary dimensions D . Furthermore the ground-state-energy and the energy gap is determined analytically in the limit $D \rightarrow \infty$. It can be shown that there is a second-order quantum phase transition, which even exists in $D = \infty$ for $h = 2J$. Interestingly, consistency between a spin-wave calculation and the perturbative quasi-particle picture is established, yielding a vanishing energy gap for $h = 2J$.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	IV
1 Einleitung	1
2 Das transversale Ising-Modell	3
3 Störungstheoretische Betrachtung der polarisierten Phase	6
3.1 1 Dimension	6
3.2 2 Dimensionen	8
3.3 3 Dimensionen	12
3.4 D Dimensionen und Limes $D \rightarrow \infty$	13
4 Phasenübergang im Limes $D = \infty$	16
4.1 Molekularfeldrechnung	16
4.1.1 Exakte Grundzustandsenergie und Phasenübergang	16
4.1.2 Ordnung des Phasenübergangs und kritischer Exponent	18
4.1.3 Magnetisierung	19
4.2 Exakte Anregungsenergie in der polarisierten Phase	20
5 Zusammenfassung und Ausblick	25
Quellenverzeichnis	26

1 Einleitung

Die Festkörperphysik beschäftigt sich häufig mit Modellen, welche die Wechselwirkung von Freiheitsgraden in Festkörpern beschreiben, da dies notwendig ist, um die physikalischen Eigenschaften dieser Systeme besser zu verstehen. Ein Beispiel hierfür ist die Wechselwirkung von Spins auf Kristallgittern, welche auf den Gitterplätzen sitzenden Atomen zugehörig sind. Es wird sich zeigen, dass es von Vorteil sein kann bestimmte festkörpertheoretische Probleme nicht ausschließlich in den üblichen drei Raumdimensionen zu betrachten. Oft lassen sich die Modelle in hohen Dimensionen D einfacher oder sogar analytisch lösen, ohne dass die zugrundeliegende Physik verloren geht. In diesem Fall können dann Rückschlüsse auf die Physik in einer, zwei oder drei Raumdimensionen gezogen werden. Die physikalische Relevanz einer oder zwei Dimensionen ist dadurch gegeben, dass in Festkörpern häufig anisotrope Kopplungen auftreten, weshalb sich in vielen Fällen einzelne Ebenen ($2D$), oder Ketten ($1D$) im Gitter isoliert voneinander betrachten lassen.

Auf diese Art und Weise lassen sich beispielsweise Phasenübergänge in Festkörpern untersuchen, sofern diese nicht im Grenzfall $D \rightarrow \infty$ verschwinden. An Phasenübergängen ändern sich die physikalischen Eigenschaften der Festkörper drastisch, sodass neue Grundzustände mit neuen Anregungen entstehen und damit Teilchenbilder, welche die vorherigen Anregungen beschreiben, zusammenbrechen. Es stellt sich die interessante Frage, ob durch Entwicklungen in $1/D$ im Grenzfall $D \rightarrow \infty$ Ergebnisse erzielt werden können, welche Rückschlüsse auf das Verhalten der Systeme in $D = 1, 2$ oder 3 zulassen [1].

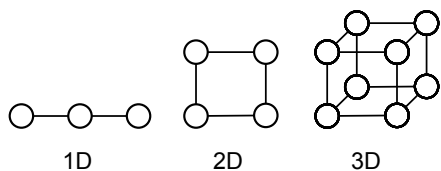


Abbildung 1.1: Betrachtete Gitter in verschiedenen Dimensionen

Ein interessantes und eines der meist untersuchten Modelle im Bezug auf Phasenübergänge ist das Ising-Modell [2]. Es wurde von Ernst Ising in seiner Arbeit im Jahre 1925 auf der eindimensionalen Kette vollständig gelöst. Die Lösung auf dem zweidimensionalen Quadratgitter wurde erst 1944 von Lars Onsager erbracht [3] (Abbildung 1.2). Das Ising-Modell mit transversalem Magnetfeld (TFIM) ist dagegen nur in einer Dimension mithilfe einer Jordan-Wigner-Transformation exakt lösbar [4]. In zwei und drei Dimensionen wurde die Stelle des Phasenübergangs numerisch zu $(h/J)^{2D} = 3,04438(2)$ beziehungsweise $(h/J)^{3D} = 5,15813(6)$ bestimmt [5]. Diese Arbeit wird sich mit dem TFIM mit ferromagnetischer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung J auf dem hyperkubischen Gitter bei $T = 0\text{ K}$ für beliebige Dimensionen D beschäftigen (siehe Abbildung 1.1). Für $D > 1$ eignen sich zur Lösung des Modells neben perturbativen Berechnungen insbesondere numerische Methoden.

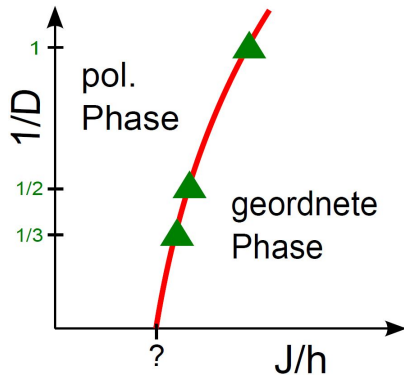


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung des Phasenübergangs (rot) in $\frac{1}{D}$ für verschiedene Verhältnisse von Kopplungsstärke J und Magnetfeld h

Das System besitzt zwei verschiedene Phasen. Für hohe Magnetfelder, also $J/h \ll 1$, stellt sich die polarisierte Phase ein, in welcher alle Spins in Magnetfeldrichtung zeigen. Ist dagegen die Kopplung zwischen den Spins gegenüber dem Magnetfeld dominant, also für $J/h \gg 1$, so stellt sich im System die geordnete Phase ein, welche sich durch eine spontane Symmetriebrechung bezüglich des Hamiltonians auszeichnet. Zwischen diesen beiden Phasen muss es, aufgrund ihrer grundlegend unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften, zu einem Phasenübergang kommen. Ein Hauptaspekt, in welchem sich die Phasen unterscheiden, ist ihre jeweilige elementare Anregung. Die elementare Anregung lässt sich in beiden Phasen durch unterschiedliche Teilchen darstellen.

An der Stelle des Quantenphasenübergangs bricht schließlich das Teilchenbild der einen Phase zusammen und eine neue Anregung, die der anderen Phase, entsteht. Während in dieser Arbeit hauptsächlich die polarisierte Phase behandelt wird, so finden sich äquivalente Rechnungen zur geordneten Phase in der Arbeit von Julia Röchner wieder [6].

Zunächst soll eine störungstheoretische Betrachtung Ergebnisse für den Grundzustand, die Dispersion und die Energielücke für spezifische Dimensionen liefern, welche sich dann auf beliebige D verallgemeinern lassen. Nach der Bestimmung des Grenzfalles für $D \rightarrow \infty$ wird sich dann herausstellen, dass der Phasenübergang für hohe Dimensionen niemals verloren geht.

Nach diesen perturbativen Berechnungen wird die Untersuchung in $D = \infty$ mit einer Molekularfeldnäherung fortgesetzt. In dieser Näherung sollen alle Spins im Mittel das gleiche Feld „spüren“, was die Rechnung erheblich vereinfacht. Es zeigt sich, dass das System, je nach Verhältnis von Kopplungsstärke und Magnetfeld, verschiedene Grundzustandsentartungen und unterschiedliches Magnetisierungsverhalten aufweist.

Damit die beiden in den zwei verschiedenen Phasen bezüglich der Anregungen verwendeten Teilchenbilder in Einklang gebracht werden können, muss die Anregungsenergie am Phasenübergang verschwinden. In $D = \infty$ kann die Anregungsenergie der polarisierten Phase mittels Spinwellenrechnung exakt bestimmt werden, sodass sich der Phasenübergang als Nullstelle der Energielücke bestimmen lässt.

Die Bachelorarbeit gliedert sich wie folgt: Im zweiten Kapitel dieser Arbeit wird zunächst das Modell eingeführt. Anschließend folgt in Kapitel 3 der perturbative Teil der Arbeit mit einer störungstheoretischen Untersuchung des Modells für verschiedene Dimensionen und abschließender Betrachtung des Grenzfalles $D \rightarrow \infty$. In Kapitel 4 wird zur analytischen Berechnung der Grundzustandsenergie ein Molekularfeldansatz gemacht, während eine anschließende Spinwellenrechnung auf analytische Ergebnisse für die Anregungsenergie des Systems abzielt. Im letzten Kapitel werden die Ergebnisse zusammengefasst und es wird kurz auf weitere mögliche Vorgehensweisen eingegangen.

2 Das transversale Ising-Modell

Das Ising-Modell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung J und transversalem Magnetfeld h ist auf einem hyperkubischen Gitter der Dimension D gegeben durch den Hamilton-Operator

$$H_{\text{TFIM}} = h \sum_i^N \sigma_i^z - J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \sigma_i^x \sigma_j^x \quad , \quad (2.1)$$

wobei i über alle Plätze und $\langle i,j \rangle$ über alle nächsten Nachbarn des Gitters läuft. Dieses Modell zeigt typischerweise zwei verschiedene physikalische Phasen. Die polarisierte Phase, um welche es in dieser Arbeit hauptsächlich gehen soll, ist adiabatisch mit dem Grenzfall hoher Magnetfelder $h \gg J$ verknüpft. Die andere Phase nennt sich geordnete Phase und wird vom System im Regime kleiner Magnetfelder $h \ll J$ angenommen.

Die folgenden Annahmen sind dimensionsunabhängig und gelten daher in allen Dimensionen D . Im ungestörten Grundzustand der polarisierten Phase bei $J = 0$ zeigen alle Spins in Magnetfeldrichtung $|\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$, da dieser Zustand wegen

$$\sigma_z |\downarrow\rangle = \sigma_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

die Energie minimiert.

Es ergibt sich daher eine Grundzustandsenergie des ungestörten Hamiltonians von $E_0 = -Nh$.

Wird nun ein einzelner Spin aus dem Grundzustand geflippt, so ergibt sich die erste Anregung des Systems $|\downarrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$. Diese Konfiguration lässt sich alternativ in einem effektiven Teilchenbild betrachten, in welchem der aus dem Grundzustand geflippte Spin durch ein Teilchen, in diesem Falle ein Hardcore-Boson, repräsentiert wird. Diese Teilchen haben die Besonderheit, dass pro Platz höchstens ein Hardcore-Boson vorhanden sein kann. Da ein aus dem Grundzustand geflippter Spin, welcher der Anwesenheit eines dieser Teilchen entspricht, nicht weiter geflippt werden kann, ist es auch nicht möglich mehr als ein Teilchen an einem Platz anzutreffen.

Für die Zustände im Teilchenbild soll also gelten:

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

Für σ^x ergibt sich:

$$\sigma^x = \sigma^+ + \sigma^- \mapsto b^\dagger + b \quad , \quad (2.4)$$

mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren b^\dagger und b mit:

$$b^\dagger |0\rangle = |1\rangle \quad , \quad b |0\rangle = 0 \quad , \quad (2.5)$$

$$b^\dagger |1\rangle = 0 \quad , \quad b |1\rangle = |0\rangle \quad . \quad (2.6)$$

σ^z lässt sich in diesem Bild ersetzen durch

$$\sigma^z \mapsto 2b^\dagger b - 1 = 2n - 1 \quad , \quad (2.7)$$

wobei n der Dichteoperator ist mit $n|0\rangle = 0$ und $n|1\rangle = 1 \cdot |1\rangle$.

Der Hamilton-Operator für beliebige Dimensionen D im Teilchenbild ergibt sich damit zu:

$$\begin{aligned} H &= h \sum_i (2n_i - 1) - J \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger) \\ &= -Nh + 2h \sum_i n_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} \underbrace{(b_i^\dagger b_j + b_i b_j^\dagger)}_{T_0} + \underbrace{b_i b_j}_{T_{-2}} + \underbrace{b_i^\dagger b_j^\dagger}_{T_{+2}} \quad . \end{aligned} \quad (2.8)$$

T_0 beschreibt einen Teilchenzahl erhaltenden Hüpfprozess eines Teilchens, während T_{+2} und T_{-2} jeweils zwei Teilchen an benachbarten Plätzen erzeugen bzw. vernichten.

Im nächsten Kapitel wird mit Gleichung 2.8 die Grundzustandsenergie und die Energie der ersten Anregung des Systems in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie perturbativ für verschiedene Dimensionen in der polarisierten Phase hergeleitet. Aus diesen Energien lassen sich dann die Dispersion ω und die Energielücke, oder auch Anregungsenergie, Δ ableiten.

Die geordnete Phase wird hier beispielhaft für den Fall einer Dimension behandelt. Der Hamilton-Operator H mit Ising-Wechselwirkung ist in der geordneten Phase genauso aufgebaut, wie im Hochfeldfall (siehe Gleichung 2.1). Jedoch ist der ungestörte Anteil H_0 nun charakterisiert durch den Kopplungsterm mit J und der Störteil V durch den Feldterm mit h . Im Grundzustand des Systems in der geordneten Phase für $h = 0$ zeigen alle Spins entweder nach rechts $|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle)$ oder nach links $|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle)$. Dies sind jeweils Eigenzustände von σ^x mit den Eigenwerten ± 1 .

Die Durchführung einer geeigneten Koordinatentransformation führt auf folgende Ersetzungen:

$$\begin{aligned} \sigma^z &\mapsto -\sigma^x \quad , \quad \sigma^x \mapsto \sigma^z \quad , \\ |\rightarrow\rangle &\mapsto |\uparrow\rangle \quad , \quad |\leftarrow\rangle \mapsto |\downarrow\rangle \quad . \end{aligned}$$

Damit besitzt der transformierte Hamilton-Operator

$$H = -h \sum_i \sigma_i^x - J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^z \sigma_j^z) \quad (2.9)$$

für $h = 0$ die Grundzustände $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$, zwischen denen der Hamiltonian nicht unterscheiden kann. Er weist eine Symmetrie bezüglich dieser beiden Grundzustände auf, welche aber im thermodynamischen Limes vom System gebrochen wird, sobald es sich für einen der beiden Zustände „entscheidet“. Es wird daher in diesem Zusammenhang auch von einer symmetriebrechenden Phase gesprochen.

Für einen Spinflip auf einer unendlich langen Kette mit periodischen Randbedingungen ergibt sich eine Energie von $E_2 = -(N - 4)J$. Der Grund ist, dass durch den

Spinflip zwei antiferromagnetische Kopplungen entstehen, deren Erzeugung jeweils eine Energie von $2J$ benötigt. Drehen sich nun aber alle benachbarten Spins ebenfalls, so bleibt lediglich ein System mit einer antiferromagnetischen Kopplung und der Energie $E_1 = -(N-2)J$ übrig. Diese Zustände $|\downarrow \dots \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$ und $|\uparrow \dots \uparrow \downarrow \dots \downarrow\rangle$ entsprechen den ersten Anregungen des Systems in der geordneten Phase. Die Stelle der antiferromagnetischen Kopplung in der Kette wird „Domänenwand“ genannt. Dies ist jedoch nur für offene Systeme oder im thermodynamischen Limes der Fall. In dem hier behandelten Falle periodischer Randbedingungen erzeugt ein Spinflip immer mindestens zwei antiferromagnetische Kopplungen.

Es werden jetzt nur noch die Kopplungen zwischen Spins betrachtet und diesen jeweils ein Pseudospin zugewiesen, welcher mit dem Index v beschrieben wird:

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle &\hat{=} |\Downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle &\hat{=} |\Uparrow\rangle \quad . \end{aligned}$$

Ein Pseudospin-Up entspricht also einer antiferromagnetischen Kopplung, während ein Pseudospin-Down eine ferromagnetische Kopplung repräsentiert.

In diesem Modell bewirkt ein Spinflip im Grundzustand demnach die Entstehung von zwei benachbarten Pseudospins, da jeweils links und rechts vom geflippten Spin zwei antiferromagnetische Kopplungen entstehen.

In diesem Modell der Pseudospins lässt sich der Hamilton-Operator vollständig durch Pauli-Matrizen τ beschreiben, welche ausschließlich auf die Kopplungen zwischen den ursprünglichen Spins wirken.

Der Hamilton-Operator hat daher die Form:

$$H^{1D} = J \sum_{v=1}^N \tau_v^z - h \sum_{v=1}^N (\tau_v^x \tau_{v+1}^x) \quad , \quad (2.10)$$

wobei die Eigenschaften der einzelnen τ -Matrizen bezüglich der Pseudospins sich nicht von der Wirkung der Pauli-Matrizen im vorherigen Modell unterscheiden.

Ein Vergleich zwischen dem Hamilton-Operator in den Pseudospins und dem Hamilton-Operator in der polarisierten Phase zeigt, dass die beiden sich durch Vertauschen von J und h ineinander überführen lassen.

Die im Hochfeldfall berechneten Energiekorrekturen lassen sich also in $D = 1$ auf den Fall niedriger Magnetfelder übertragen und die Ergebnisse sind in beiden Phasen dieselben. Dies ist für $D > 1$ jedoch nicht mehr der Fall.

Im Folgenden wird der Fokus ausschließlich auf die physikalischen Eigenschaften der polarisierten Phase als Funktion der Dimension D gelegt.

3 Störungstheoretische Betrachtung der polarisierten Phase

Das Ziel ist es nun, sowohl Grundzustandsenergie E_0 , als auch Anregungsenergie E_1 und Energielücke Δ des Modells in verschiedenen Dimensionen störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung zu bestimmen. Der Hamilton-Operator wird dazu folgendermaßen genähert [7]:

$$P_n H_{\text{eff}} P_n = P_n H_0 P_n + P_n V P_n + P_n V Q_n \frac{1}{E_0 - Q_n H_0 Q_n} Q_n V P_n + \mathcal{O}(V^3) \quad , \quad (3.1)$$

wobei in der polarisierten Phase H_0 den ungestörten Feldterm und V die Störung in Form des Ising-Kopplungsterms beschreibt. Die P_n sind Projektoren auf den n -Teilchenraum und sollen gewährleisten, dass der jeweilig betrachtete Hilbertraum nicht verlassen wird, während die Q_n auf alle anderen Zustände, außer den n -Teilchenzustand projizieren. Es werden jeweils die Fälle $n = 0$ und $n = 1$ behandelt, wobei für $n = 1$ eine Fouriertransformation zur Diagonalisierung des Hamilton-Operators durchgeführt werden muss.

3.1 1 Dimension

Mit dem Grundzustand $|0\rangle$ und dem ersten angeregten Zustand $|j\rangle$ des Systems ergibt sich mit Gleichung 2.8 in nullter Ordnung Störungsrechnung:

$$\begin{aligned} E_0^{(0)} &= \langle 0 | P_0 H_0 P_0 | 0 \rangle = -Nh \\ E_1^{(0)} &= \langle j | P_1 H_0 P_1 | j \rangle = -(N-2)h \quad . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Diese Energien werden sich mit steigender Dimension nicht ändern und werden daher nicht mehr explizit angegeben.

Für die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungsrechnung bezüglich des Grundzustands ergibt sich:

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | P_0 V P_0 | 0 \rangle = \langle 0 | P_0 (T_0 + T_{+2} + T_{-2}) | 0 \rangle = 0 \quad (3.3)$$

und für den 1-Teilchen-Zustand:

$$\begin{aligned} \langle j' | P_1 V P_1 | j \rangle &= -J \langle j' | P_1 T_0 P_1 | j \rangle = \langle j' | P_1 \sum_i (b_i^\dagger b_{i+1} + b_i b_{i+1}^\dagger) | j \rangle \\ &= -J(\langle j' | j-1 \rangle + \langle j' | j+1 \rangle) \\ &= -J(\delta_{j',j-1} + \delta_{j',j+1}) \quad . \end{aligned} \quad (3.4)$$

Das Teilchen kann also in erster Ordnung Störungsrechnung in beiden Richtungen auf der Kette um jeweils einen Platz hüpfen.

In zweiter Ordnung Störungstheorie ergibt sich für die Korrektur der Grundzustandsenergie:

$$\begin{aligned}
E_0^{(2)} &= \langle 0 | P_0 V Q \frac{1}{E_0 - Q H_0 Q} Q V P_0 | 0 \rangle = -J^2 \langle 0 | P_0 T_{-2} Q \frac{1}{E_0 - Q H_0 Q} Q T_{+2} | 0 \rangle \\
&= -J^2 \langle 0 | P_0 T_{-2} Q \frac{1}{E_0 - Q H_0 Q} Q \sum_i |i\rangle |i+1\rangle = -\frac{J^2}{4h} \langle 0 | P_0 T_{-2} \sum_i |i\rangle |i+1\rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} N \quad . \quad (3.5)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die gesamte Grundzustandsenergie bis zur zweiten Ordnung zu:

$$E_0^{1D} = -Nh - \frac{J^2}{4h} N \quad (3.6)$$

$$\Leftrightarrow e_0^{1D} = \frac{E_0^{1D}}{N} = -h - \frac{J^2}{4h} \quad . \quad (3.7)$$

Für 1-Teilchen-Zustände $|j\rangle, |j'\rangle$ ergibt sich in zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned}
\langle j' | P V Q \frac{1}{E_0 - Q H_0 Q} Q V P | j \rangle &= J^2 \langle j' | P T_{-2} Q \frac{1}{E_0 - Q H_0 Q} Q T_{+2} P | j \rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle j' | P T_{-2} \sum_{i \neq (j, j-1)} |j\rangle |i\rangle |i+1\rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle j' | (|j-2\rangle + |j+2\rangle + N |j\rangle) \quad . \quad (3.8)
\end{aligned}$$

In zweiter Ordnung Störungsrechnung kann das Teilchen also um 2 Plätze in beide Richtungen auf der Kette hüpfen.

Zur Bestimmung der Dispersion des 1-Teilchen-Zustands in erster und zweiter Ordnung ist es nötig, eine Fouriertransformation der Zustände durchzuführen. Aufgrund der vorliegenden Translationssymmetrie des Gitters bzw. der Kette ist der betrachtete Hamilton-Operator impulserhaltend und damit diagonal im Impulsraum. Die Fouriertransformierten der 1-Teilchen-Zustände berechnen sich nach:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} |j\rangle \quad . \quad (3.9)$$

Damit ergibt sich in erster Ordnung unter Verwendung periodischer Randbedingungen:

$$\begin{aligned}
\langle k | P V P | k \rangle &= \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} P V P | j \rangle \\
&= -J \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} (|j-1\rangle + |j+1\rangle) \\
&= -J \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{j=1}^N e^{-ik(j+1)} |j\rangle + \sum_{j=1}^N e^{-ik(j-1)} |j\rangle \right) \\
&= -2J \cos(k) \quad . \quad (3.10)
\end{aligned}$$

Die Korrektur in zweiter Ordnung betragt:

$$\begin{aligned}
\langle k | PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QVP | k \rangle &= \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QVP | j \rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} (|j-2\rangle + |j+2\rangle + (N-2)|j\rangle) \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle k | \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{j=1}^N (e^{-ik(j+2)} + e^{-ik(j-2)} + (N-2)e^{-ikj}) \right) | j \rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} ((N-2) + 2 \cos(2k)) \quad . \quad (3.11)
\end{aligned}$$

Fur die erste Anregung ergibt sich damit perturbativ bis zur zweiten Ordnung eine Energie von:

$$\begin{aligned}
E_1^{1D} = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} &= -Nh - \frac{J^2}{4h} N + 2h - 2J \cos k + \frac{J^2}{2h} - \frac{J^2}{2h} \cos 2k \\
&= -Nh - \frac{J^2}{4h} N + \omega_{(k)} \quad , \quad (3.12)
\end{aligned}$$

mit $\omega_{(k)}$ als Dispersion. Die Anregungsenergie fur den 1-Teilchen-Zustand, auch Energielucke genannt, wird als Minimum der Dispersion bei $k = 0$ beschrieben durch:

$$\Delta^{1D} = \omega_{(k=0)} = 2h - 2J + \frac{J^2}{2h} - \frac{J^2}{2h} = 2h - 2J \quad .$$

In Einheiten von h ergibt sich damit:

$$\frac{\Delta^{1D}}{h} = 2 - 2\frac{J}{h} \quad . \quad (3.13)$$

Dieses Ergebnis ist konsistent mit den Ergebnissen der exakten Rechnung [8].

3.2 2 Dimensionen

Die Betrachtung des eingefuhrten Teilchenbildes auf dem zweidimensionalen Quadratgitter fuhrt wieder auf den Hamilton-Operator in Gleichung 2.8, wobei die Indizes i und j hier zweidimensional sind.

In erster Ordnung Storungstheorie fur den Grundzustand ist offensichtlich

$$E_0^{(1)} = \langle 0 | PVP | 0 \rangle = -J \langle 0 | P(T_0 + T_{+2} + T_{-2})P | 0 \rangle = 0 \quad . \quad (3.14)$$

Im Grundzustand verschwindet also die Energiekorrektur erster Ordnung.
In zweiter Ordnung Störungstheorie ergibt sich:

$$\begin{aligned}
E_0^{(2)} &= \langle 0 | PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QVP | 0 \rangle = J^2 \langle 0 | PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} Q(T_0 + T_{+2} + T_{-2})P | 0 \rangle \\
&= J^2 \langle 0 | PT_{-2}Q \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QT_{+2}P | 0 \rangle \\
&= J^2 \langle 0 | PT_{-2}Q \frac{N_B}{E_0 - QH_0Q} | 2 \rangle \\
&= J^2 \frac{N_B}{-Nh - (-N + 4)h} = -\frac{J^2}{4h} N_B \\
&= -\frac{J^2}{2h} N \quad . \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Alle anderen Kombinationen von den T_i verschwinden, weil sie entweder aus dem betrachteten Hilbertraum herausführen oder, weil ein Vernichter auf einen 0-Teilchen-Zustand wirken würde. $N_B = 2N$ beschreibt hier die Anzahl an Bonds in 2 Dimensionen. Es ergibt sich nach Wirken von T_{+2} eine Überlagerung von allen möglichen 2-Teilchen-Zuständen. Daher der extensive Faktor.

Im Folgenden soll gelten:

$$\vec{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} l \\ m \end{pmatrix} \quad , \tag{3.16}$$

$$\vec{d}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{d}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.17}$$

Die Energiekorrektur erster Ordnung der 1-Teilchen-Zustände lautet damit:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PVP | \vec{r} \rangle &= -J \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PT_0P | \vec{r} \rangle \\
&= -J \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | P \sum_i (b_i^\dagger b_{i+d} + b_i b_{i+d}^\dagger) | \vec{r} \rangle \\
&= -J \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | P \left[|\vec{r} - \vec{d}_2\rangle + |\vec{r} - \vec{d}_1\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_1\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_2\rangle \right] \\
&= -J [\delta_{n,0}\delta_{\tilde{n},-1} + \delta_{n,-1}\delta_{\tilde{n},0} + \delta_{n,1}\delta_{\tilde{n},0} + \delta_{n,0}\delta_{\tilde{n},1}] \quad . \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Offensichtlich können Teilchen sowohl in der horizontalen, als auch in der vertikalen Richtung um je einen Platz hüpfen.

Zur Berechnung der Dispersion werden erneut die Fourier-Transformierten

$$|\vec{k}\rangle = |k_1, k_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i\vec{r}\vec{k}} |\vec{r}\rangle \tag{3.19}$$

der 1-Teilchen-Zustände betrachtet.

Es folgt in erster Ordnung:

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \langle \vec{k} | PVP | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k} | PVP \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} | \vec{r} \rangle = \langle \vec{k} | P \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} V | \vec{r} \rangle \\
&= -J \langle \vec{k} | P \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} [|\vec{r} - \vec{d}_2\rangle + |\vec{r} - \vec{d}_1\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_1\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_2\rangle] \\
&= -J \langle \vec{k} | P \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} [e^{-ik_2} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{ik_1}] | \vec{r} \rangle \\
&= -2J[\cos(k_1) + \cos(k_2)] \quad . \quad (3.20)
\end{aligned}$$

Und für die Energiekorrektur des 1-Teilchen-Zustandes in zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned}
E_1^{(2)} &= \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PVQ \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QVP | \vec{r} \rangle \\
&= J^2 \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PT_{-2}Q \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QT_{+2}P | \vec{r} \rangle \\
&= J^2 \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PT_{-2}Q \frac{1}{E_1 - QH_0Q} Q \sum_{(i) \neq (\vec{r}); (\vec{r}-\vec{d}_1); (\vec{r}-\vec{d}_2)} [|\vec{r}\rangle | i\rangle | i + d\rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | PT_{-2} \sum_{(i) \neq (\vec{r}); (\vec{r}-\vec{d}_1); (\vec{r}-\vec{d}_2)} [|\vec{r}\rangle | i\rangle | i + d\rangle \\
&= -\frac{J^2}{4h} \langle \vec{r} + n\vec{d}_1 + \tilde{n}\vec{d}_2 | [|A\rangle + 2|B\rangle] \quad (3.21)
\end{aligned}$$

mit

$$|A\rangle = (N_B - 4) |\vec{r}\rangle + |\vec{r} - 2\vec{d}_1\rangle + |\vec{r} + 2\vec{d}_1\rangle + |\vec{r} - 2\vec{d}_2\rangle + |\vec{r} + 2\vec{d}_2\rangle \quad (3.22)$$

$$|B\rangle = |\vec{r} - \vec{d}_1 - \vec{d}_2\rangle + |\vec{r} - \vec{d}_1 + \vec{d}_2\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_1 - \vec{d}_2\rangle + |\vec{r} + \vec{d}_1 + \vec{d}_2\rangle \quad . \quad (3.23)$$

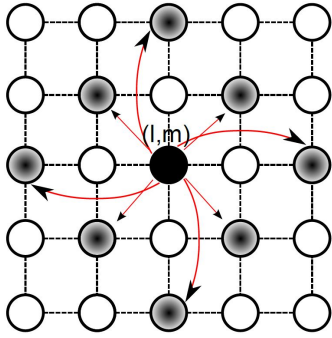


Abbildung 3.1: Teilchen (schwarz) kann in zweiter Ordnung in $D = 2$ auf schattierte Plätze hüpfen

Der Term $(N_B - 4) |\vec{r}\rangle$ ist dadurch begründet, dass das Teilchen aus dem ursprünglichen 1-Teilchen-Zustand nach Wirken der Störung immer genau dann an seinem Platz bleibt, wenn der Operator T_{-2} nicht an einem seiner 4 „Nachbonds“ wirkt. Der Faktor zwei vor dem $|B\rangle$ ist nötig, weil das Hüpfen der Teilchen auf die Eckplätze auf zwei verschiedenen Wegen möglich ist. Teilchen können nun offenbar sowohl auf Eckplätze, als auch horizontal und vertikal um jeweils zwei Plätze „springen“ (siehe Abbildung 3.1).

Die Dispersion berechnet sich zu:

$$\begin{aligned}\langle \vec{k} | PVQ \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QVP | \vec{k} \rangle &= -\frac{J^2}{4h} \langle \vec{k} | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} [|A\rangle + 2|B\rangle] \\ &= -\frac{J^2}{4h} \langle \vec{k} | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} e^{-i(\vec{r}\vec{k})} |\vec{r}\rangle \cdot C\end{aligned}\quad (3.24)$$

mit

$$\begin{aligned}C &= (N_B - 4) + e^{-i2k_1} + e^{i2k_1} + e^{i2k_2} + e^{-i2k_2} + \\ &2(e^{-i(k_1+k_2)} + e^{i(k_1-k_2)} + e^{-i(k_1-k_2)} + e^{i(k_1+k_2)})\end{aligned}\quad (3.25)$$

Daraus folgt schließlich:

$$E_1^{(2)} = -\frac{J^2}{2h} [\cos(2k_1) + \cos(2k_2) + 2\cos(k_1 + k_2) + 2\cos(k_1 - k_2) + (N - 2)]\quad (3.26)$$

Die Energiekorrekturen bis zur zweiten Ordnung Störungstheorie betragen also für den Grundzustand:

$$E_0^{2D} = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -Nh - \frac{J^2}{2h}N\quad (3.27)$$

und für den ersten angeregten Zustand:

$$\begin{aligned}E_1^{2D} &= E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} \\ &= -(N - 2)h - 2J[\cos(k_1) + \cos(k_2)] \\ &\quad - \frac{J^2}{2h} [\cos(2k_1) + \cos(2k_2) + 2\cos(k_1 + k_2) + 2\cos(k_1 - k_2) + (N - 2)]\end{aligned}\quad (3.28)$$

Daraus ergibt sich schließlich folgende Dispersion:

$$\begin{aligned}E_1^{2D} - E_0^{2D} &= 2h - 2J[\cos(k_1) + \cos(k_2)] + \frac{J^2}{h}(1 - \cos(k_1 + k_2) - \cos(k_1 - k_2)) \\ &\quad - \frac{J^2}{2h} [\cos(2k_1) + \cos(2k_2)]\end{aligned}\quad (3.29)$$

Für die Energielücke $\Delta^{2D} = \omega_{(\mathbf{k}=0)}^{2D}$ folgt damit in Einheiten von h :

$$\frac{\Delta^{2D}}{h} = 2 - 4\frac{J}{h} - 2\frac{J^2}{h^2}\quad (3.30)$$

Es kann gezeigt werden, dass sich das transversale Ising-Modell auf dem 2D-Quadratgitter bezüglich der Grundzustandsenergie e_0 übertragen lässt auf das Ising-Modell auf dem kubischen Gitter für hohe Temperaturen T . Die Rechnung konnte daher mit den Ergebnissen in [9] verifiziert werden.

3.3 3 Dimensionen

Zur Berechnung der Energiekorrekturen in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie in drei Dimensionen wird die in 2D gewählte Notation mit \vec{k} und \vec{d} lediglich um eine Komponente erweitert.

Auch in drei Dimensionen verschwindet die Korrektur zur Grundzustandsenergie in erster Ordnung. In zweiter Ordnung ergibt sich:

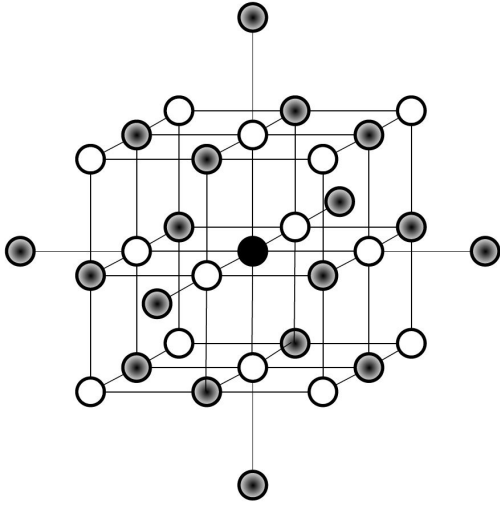
$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \langle 0 | PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QVP | 0 \rangle = J^2 \langle 0 | PT_{-2}Q \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QT_{+2}P | 0 \rangle \\ &= -\frac{J^2}{4h} N_B = -\frac{3J^2}{4h} N \quad . \end{aligned} \quad (3.31)$$

Mit der Anzahl $N_B = 3N$ an Bonds des kubischen Gitters.

Für die Korrekturen der ersten Anregung folgt:

$$E_1^{(1)} = \langle \vec{r} | PVP | \vec{r} \rangle = -J \langle \vec{r} | T_0 | \vec{r} \rangle = -J \langle \vec{r} | \sum_{j=1}^3 |\vec{r} \pm \vec{d}_j\rangle \quad , \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \langle \vec{r} | PVQ \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QVP | \vec{r} \rangle = J^2 \langle \vec{r} | PT_{-2}Q \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QT_{+2} | \vec{r} \rangle \\ &= -\frac{J^2}{4h} (N_B - 6) - \frac{J^2}{4h} \left[\sum_{j=1}^3 |\vec{r} + 2\vec{d}_j\rangle + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 |\vec{r} \pm \vec{d}_i \pm \vec{d}_j\rangle \right] \quad . \end{aligned} \quad (3.33)$$



Es wird deutlich, dass das Teilchen in erster Ordnung in jede Richtung um jeweils einen Platz hüpfen kann. In zweiter Ordnung kann es dagegen in jede Raumrichtung um zwei Plätze, sowie auf die auf jeweils zwei Wegen erreichbaren 12 Eckplätze hüpfen (siehe Abbildung 3.2). Dieselben beziehungsweise dazu äquivalente Hüpfsterme werden auch in allen höheren Dimensionen auftreten.

Abbildung 3.2: Teilchen (schwarz) kann in zweiter Ordnung in $D = 3$ auf schattierte Plätze hüpfen

Die Fouriertransformation der Ortszustände führt auf:

$$E_1^{(1)} = \langle \vec{k} | PVP | \vec{k} \rangle = -2J \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) \quad , \quad (3.34)$$

$$E_1^{(2)} = -\frac{3J^2}{4h}(N-2) - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^3 \cos(2k_j) - \frac{J^2}{2h} \sum_{i \neq j} [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \quad . \quad (3.35)$$

Die Energiekorrekturen in zweiter Ordnung Störungstheorie betragen damit für den Grundzustand:

$$E_0^{3D} = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -Nh - \frac{3J^2}{4h}N \quad (3.36)$$

$$\Leftrightarrow e_0^{3D} = \frac{E_0^{3D}}{N} = -h - \frac{3J^2}{4h} \quad (3.37)$$

und für den ersten angeregten Zustand insgesamt:

$$\begin{aligned} E_1^{3D} = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = & -(N-2)h - 2J \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) - \frac{3J^2}{4h}(N-2) - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^3 \cos(2k_j) \\ & - \frac{J^2}{2h} \sum_{i \neq j} [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \quad . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Daraus ergibt sich schließlich folgende Dispersion:

$$\begin{aligned} \omega_{(\mathbf{k})}^{3D} = E_1^{3D} - E_0^{3D} = & 2h - 2J \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) + \frac{3J^2}{h} - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^3 \cos(2k_j) \\ & - \frac{J^2}{2h} \sum_{i \neq j} [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \quad . \end{aligned} \quad (3.39)$$

Für die Energielücke $\Delta^{3D} = \omega_{(\mathbf{k}=0)}^{3D}$ folgt damit in Einheiten von h :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta^{3D}}{h} &= 2 - 6\frac{J}{h} + \frac{3J^2}{2h^2} - \frac{3J^2}{2h^2} - \frac{6J^2}{h^2} \\ &= 2 - 6\frac{J}{h} - 6\frac{J^2}{h^2} \quad . \end{aligned} \quad (3.40)$$

3.4 D Dimensionen und Limes $D \rightarrow \infty$

Im Folgenden sollen die Energiekorrekturen in D Dimensionen perturbativ hergeleitet werden. Dafür lässt sich die verwendete Notation durch $|\vec{r}\rangle = |x_1, x_2, \dots, x_D\rangle$ und $|\vec{k}\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_D\rangle$, sowie den D Einheitsrichtungsvektoren \vec{d}_i leicht auf beliebige Dimensionen verallgemeinern.

Neben der verschwindenden Korrektur erster Ordnung zur Grundzustandsenergie ergibt die Rechnung in zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned} E_0^{(2)} &= \langle 0 | PVQ \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QVP | 0 \rangle = J^2 \langle 0 | PT_{-2}Q \frac{1}{E_0 - QH_0Q} QT_{+2}P | 0 \rangle \\ &= -\frac{J^2}{4h} N_B = -\frac{J^2}{4h} DN \quad . \end{aligned} \quad (3.41)$$

Für die 1. Anregung folgt:

$$E_1^{(1)} = \langle \vec{r} | PVP | \vec{r} \rangle = -J \langle \vec{r} | \sum_{j=1}^D |\vec{r} \pm \vec{d}_j \rangle \quad , \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \langle \vec{r} | PVQ \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QVP | \vec{r} \rangle = J^2 \langle \vec{r} | PT_{-2}Q \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QT_{+2} | \vec{r} \rangle \\ &= -\frac{J^2}{4h} (N_B - 2D) - \frac{J^2}{4h} \left[\sum_{j=1}^D |\vec{r} + 2\vec{d}_j \rangle + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^D |\vec{r} \pm \vec{d}_i \pm \vec{d}_j \rangle \right] \quad . \end{aligned} \quad (3.43)$$

Das Teilchen weist also offensichtlich auch beim Hüpfen in beliebigen Dimensionen das erwartete Verhalten auf. Die Dispersion in D Dimensionen ergibt sich damit zu:

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle \vec{k} | PVP | \vec{k} \rangle = -J \langle \vec{k} | P \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{r}} \sum_{j=1}^D e^{-i\vec{k}(\vec{r} \pm \vec{d}_j)} | \vec{r} \rangle \\ &= -2J \sum_{j=1}^D \cos(k_j) \quad , \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \langle \vec{k} | PVQ \frac{1}{E_1 - QH_0Q} QVP | \vec{k} \rangle \\ &= -\frac{J^2}{4h} D(N-2) - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^D \cos(2k_j) - \frac{J^2}{2h} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^D [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \end{aligned} \quad (3.45)$$

Zusammengefasst betragen die Energiekorrekturen bis zur zweiten Ordnung für den Grundzustand:

$$E_0^{DD} = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -Nh - \frac{J^2}{4h} DN \quad (3.46)$$

$$\Leftrightarrow e_0^{DD} = \frac{E_0^{DD}}{N} = -h - \frac{J^2}{4h} D \quad (3.47)$$

und für den ersten angeregten Zustand:

$$\begin{aligned}
E_1^{DD} &= E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} \\
&= -(N-2)h - 2J \sum_{j=1}^D \cos(k_j) - \frac{J^2}{4h} D(N-2) - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^D \cos(2k_j) \\
&\quad - \frac{J^2}{2h} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^D [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \quad .
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Die gesamte Dispersion lautet:

$$\begin{aligned}
\omega_{(\mathbf{k})}^{DD} = E_1^{DD} - E_0^{DD} &= 2h - 2J \sum_{j=1}^D \cos(k_j) + \frac{J^2}{2h} D - \frac{J^2}{2h} \sum_{j=1}^D \cos(2k_j) \\
&\quad - \frac{J^2}{2h} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^D [\cos(k_i + k_j) + \cos(k_i - k_j)] \quad .
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Für die Energielücke folgt damit in Einheiten von h :

$$\frac{\Delta^{DD}}{h} = 2 - 2D \frac{J}{h} - D(D-1) \frac{J^2}{h^2} \quad . \tag{3.50}$$

Zur Grenzwertbestimmung der Energielücke Δ^{DD} für $D \rightarrow \infty$, ist es nun notwendig den Hamilton-Operator umzukalieren, indem im Hamilton-Operator bzw. in den Ergebnissen die Ersetzung $J \rightarrow \frac{J}{D}$ gemacht wird. Dadurch soll vermieden werden, dass die Energie pro Platz divergiert, weil die Anzahl der Kopplungen extensiv mit der Dimension wächst. Es zeigt sich:

$$\lim_{D \rightarrow \infty} \frac{\Delta^{DD}}{h} = 2 - 2 \frac{J}{h} - \frac{J^2}{h^2} \quad . \tag{3.51}$$

In Tabelle 3.1 sind für einen abschließenden Vergleich die verschiedenen Anregungsenergien in den jeweiligen Dimensionen aufgelistet.

	Δ/h
2-dim	$2 - 4 \frac{J}{h} - 2 \frac{J^2}{h^2}$
3-dim	$2 - 6 \frac{J}{h} - \frac{9}{2} \frac{J^2}{h^2}$
D-dim	$2 - 2D \left(\frac{J}{h} + \frac{J^2}{h^2} \right)$
$D \rightarrow \infty$	$2 - 2 \frac{J}{h} - \frac{J^2}{h^2}$

Tabelle 3.1: Vergleich der Energielücken Δ für verschiedene Dimensionen D

Im folgenden Kapitel soll nun die hier perturbativ hergeleitete Energielücke Δ neben der Grundzustandsenergie E_0 für den Grenzfall $D = \infty$ mithilfe einer Spinwellenrechnung beziehungsweise einer Molekularfeldnäherung exakt bestimmt werden. Zusätzlich wird das Ergebnis verglichen mit der Energielücke in der geordneten Phase [6], um das System bezüglich des Phasenübergangs hin untersuchen zu können.

4 Phasenübergang im Limes $D = \infty$

Die bisherige Rechnung war störungstheoretischer Natur und daher nicht exakt. Ein Vergleich der perturbativ berechneten Energielücken der polarisierten und der geordneten Phase [6] zeigt insbesondere, dass diese nicht am selben Punkt schließen. Aus diesem Grund folgt nun eine analytische Berechnung von Grundzustandsenergie und Energielücke auf dem hyperkubischen Gitter mithilfe einer Molekularfeldnäherung beziehungsweise einer Spinwellenrechnung in $D = \infty$.

4.1 Molekularfeldrechnung

4.1.1 Exakte Grundzustandsenergie und Phasenübergang

Als Grundzustand wird eine Überlagerung aus Up- und Down-Spins

$$|\Psi_0\rangle = \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle_i + \sin \alpha |\downarrow\rangle_i) \quad (4.1)$$

in Abhängigkeit von einem Parameter α vorausgesetzt, wodurch eine variationelle Bestimmung des Energieminimums des Hamiltonians

$$H = h \sum_j \sigma_j^z - \frac{J}{D} \sum_{j,d} \sigma_j^x \sigma_{j+d}^x \quad (4.2)$$

möglich wird. Der Beitrag des Feldterms ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | H_{\text{Feld}} | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | h \sum_j \sigma_j^z \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle_i + \sin \alpha |\downarrow\rangle_i) \\ &= h \sum_j (\cos \alpha \langle \uparrow |_j + \sin \alpha \langle \downarrow |_j) (\cos \alpha |\uparrow\rangle_j - \sin \alpha |\downarrow\rangle_j) \\ &= hN(\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \quad . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Der Ising-Term liefert:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | H_{\text{Ising}} | \Psi_0 \rangle &= -\frac{J}{D} \langle \Psi_0 | \sum_{j,d} \sigma_j^x \sigma_{j+d}^x \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle_i + \sin \alpha |\downarrow\rangle_i) \\ &= -4JN \cos^2(\alpha) \sin^2(\alpha) \quad . \end{aligned} \quad (4.4)$$

Damit ergibt sich insgesamt eine Grundzustandsenergie von

$$\frac{E_0(\alpha)}{N} = e_0(\alpha) = h \cos(2\alpha) - J \sin^2(2\alpha) \quad . \quad (4.5)$$

Gesucht ist das α , welches die Energie minimiert:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} e_0(\alpha) = -2 \sin(2\alpha)[h + 2J \cos(2\alpha)] \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.6)$$

Daraus folgen mit $n \in \mathbb{N}$ die Lösungen:

$$\alpha_1 = n \frac{\pi}{2} \quad , \quad \alpha_2 = \pm \frac{1}{2} \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right) \quad . \quad (4.7)$$

Für α_2 muss $h < 2J$ gelten, da $h, J > 0$ und der $\arccos(\alpha)$ nur für $\alpha \in [-1, 1]$ definiert ist. Damit ergibt sich weiter:

$$\frac{\partial^2 e_0}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=0} = -8J - 4h < 0 \Rightarrow \text{Maximum}, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial^2 e_0}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=\pm \frac{\pi}{2}} = 4h - 8J > 0 \quad \text{für } h > 2J \Rightarrow \text{Minimum}, \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 e_0}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=\frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-h}{2J}\right)} &= -4h \cos\left(\arccos\left(-\frac{h}{2J}\right)\right) - 8J \cos\left(2 \arccos\left(-\frac{h}{2J}\right)\right) \\ &= -2 \frac{h^2}{J} + 8J > 0 \quad \text{für } h < 2J \Rightarrow \text{Minimum} \quad . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 aufgelistet.

	α_0	$e_0(\alpha_0)$
$h < 2J$	$\pm \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-h}{2J}\right)$	$-J - \frac{h^2}{4J}$
$h > 2J$	$\pm \frac{\pi}{2}$	$-h$

Tabelle 4.1: Minima für Grundzustandsenergie

Abbildung 4.1.1(a) zeigt die aus der Molekularfeldrechnung hergeleitete Grundzustandsenergie pro Platz aufgetragen gegen $x = \frac{J}{h}$ in Einheiten von h und deren zweite Ableitung $e_0'' = \frac{d^2}{dx^2} e_0$.

Der Sprung in der zweiten Ableitung der Grundzustandsenergie (siehe Abbildung 4.1.1(b)) deutet auf einen Phasenübergang bei $\frac{J}{h} = \frac{1}{2}$ hin. Für $\alpha_1 = \pm \frac{\pi}{2}$ ergibt sich der Grundzustand $|\Psi_0\rangle = |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle$, welcher dem Grenzfall hoher Felder entspricht und für $\alpha_2 = \pm \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-h}{2J}\right)$ folgt für den Fall kleiner Felder:

$$\lim_{\frac{h}{J} \rightarrow 0} \alpha_2 = \lim_{\frac{h}{J} \rightarrow 0} \pm \frac{1}{2} \arccos\left(\frac{-h}{2J}\right) = \pm \frac{\pi}{4} \quad . \quad (4.11)$$

Dies entspricht gerade dem Zustand

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle (\alpha = \pm \frac{\pi}{4}) &= \prod_i (\cos \frac{\pi}{4} |\uparrow\rangle_i \pm \sin \frac{\pi}{4} |\downarrow\rangle_i) \\ &= \prod_i \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_i \pm |\downarrow\rangle_i) \quad , \end{aligned} \quad (4.12)$$

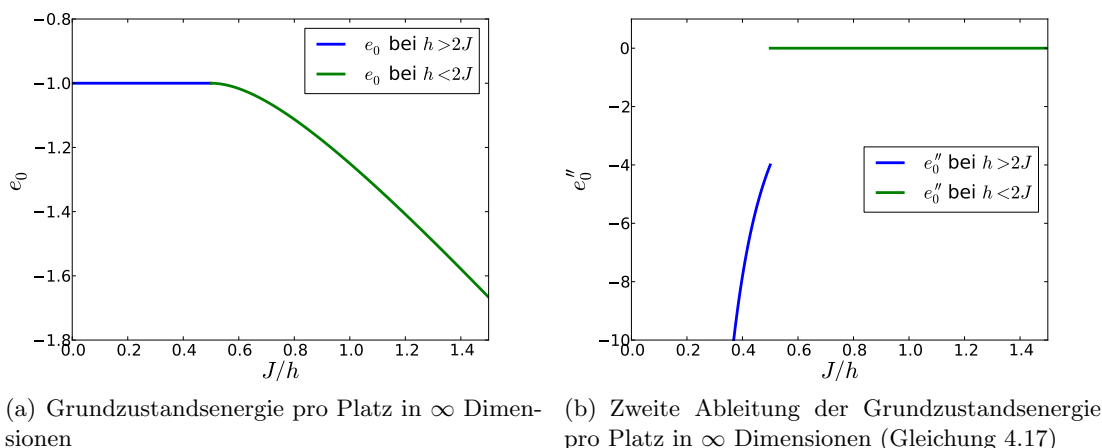


Abbildung 4.1: Grundzustandsenergie

also den Zuständen $|\rightarrow\rangle$ und $|\leftarrow\rangle$ und damit den beiden Grundzustände der geordneten Phase für $h = 0$. Dies entspricht genau den Erwartungen, da der Grundzustand in beiden Phasen der Zustand niedrigster Energie sein soll und das berechnete α genau dieses Energieminimum liefert.

Zusammengefasst besitzt das System in der polarisierten Phase einen einzigen Grundzustand, während es in der geordneten Phase zwei Grundzustände aufweist. Dies kann nur durch einen Phasenübergang zwischen beiden Phasen erklärt werden, welcher aufgrund der vorliegenden Ergebnisse (Abbildung 4.1.1) bei $\frac{J}{h} = \frac{1}{2}$ liegen muss. Im nächsten Kapitel soll daher auf die Ordnung dieses Phasenübergangs, sowie etwaige kritische Exponenten eingegangen werden.

4.1.2 Ordnung des Phasenübergangs und kritischer Exponent

Die Grundzustandsenergie pro Platz in $D = \infty$ in Einheiten von h ergibt sich aus der Molekularfeldrechnung zu:

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

$$\frac{e_0}{h} = -1 \quad \text{für } h > 2J \quad . \quad (4.14)$$

Es ist wichtig, dass diese Rechnung erst für den Grenzfall $D = \infty$ exakt ist, da der Ansatz der verwendeten Produktwellenfunktion erst dann das System korrekt beschreibt. Der Grund ist, dass die mit größerer Dimension wachsende Anzahl an Kopplungen für jeden Platz erst für unendliche Dimensionen dazu führt, dass der Störterm im Hamilton-Operator exakt als Molekularfeld genähert werden kann [10].

Weiterführend soll nun die Ordnung des gefundenen Phasenübergangs bestimmt werden.

Mit $x = \frac{J}{h}$ gilt:

$$x < \frac{1}{2} : \quad \frac{\partial}{\partial x} \frac{e_0}{h} \Big|_{x_0=\frac{1}{2}} = -1 - \frac{1}{4} \frac{1}{x_0^2} = 0 \quad , \quad (4.15)$$

$$x > \frac{1}{2} : \quad \frac{\partial}{\partial x} \frac{e_0}{h} = 0 \quad . \quad (4.16)$$

Die Grundzustandsenergie $\frac{e_0}{h}$ ist also stetig differenzierbar an der Stelle $h = 2J$ und damit ist ein Phasenübergang erster Ordnung auszuschließen.

Die Betrachtung von

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{e_0}{h} \Big|_{x_0=\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{x_0^3} = -4 \neq 0 \quad \text{für } x < \frac{1}{2} \quad (4.17)$$

offenbart einen Sprung der zweiten Ableitung an der Stelle $x = \frac{1}{2}$. Damit ist nachgewiesen, dass es sich hier um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handeln muss.

Schließlich lässt sich noch der kritische Exponent β der Magnetisierung M^x bestimmen. Hierzu muss das Verhalten von $\langle \sigma^x \rangle$ an der Stelle $\frac{h}{J} = 2 - \epsilon$ für $\epsilon \ll 1$ untersucht werden. Es folgt:

$$\begin{aligned} \langle \sigma^x \rangle &= \pm \sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{h^2}{J^2}} = \pm \sqrt{1 - \frac{1}{4} (2 - \epsilon)^2} \\ &= \pm \sqrt{\epsilon - \frac{1}{4} \epsilon^2} \\ &\approx \pm \sqrt{\epsilon} \\ &= \pm \epsilon^{\beta=\frac{1}{2}} \quad . \end{aligned} \quad (4.18)$$

Dies entspricht exakt dem Ordnungsparameter β der Landau-Theorie [11].

Zur weiteren Verifizierung der Ergebnisse soll im nächsten Schritt die Magnetisierung des Systems in beiden Phasen untersucht werden.

4.1.3 Magnetisierung

Für die Magnetisierung pro Platz in x - bzw. z -Richtung ergibt sich bezüglich des Grundzustands $|\Psi_0\rangle = \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle + \sin \alpha |\downarrow\rangle)$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \sigma^x | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | \sigma^x \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle + \sin \alpha |\downarrow\rangle) \\ &= \langle \Psi_0 | \prod_i (\cos \alpha |\downarrow\rangle + \sin \alpha |\uparrow\rangle) \\ &= 2 \sin(\alpha) \cos(\alpha) \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \sigma^z | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | \sigma^z \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle + \sin \alpha |\downarrow\rangle) \\ &= \langle \Psi_0 | \prod_i (\cos \alpha |\uparrow\rangle - \sin \alpha |\downarrow\rangle) \\ &= \cos^2(\alpha) - \sin^2(\alpha) \quad . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Daraus folgt mit den $\alpha_{1,2}$:

$$\langle \sigma^x \rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } h > 2J \\ \pm \sqrt{1 - \frac{1}{4} \frac{h^2}{J^2}}, & \text{für } h < 2J \end{cases} \quad (4.21)$$

$$\langle \sigma^z \rangle = \begin{cases} -1 & \text{für } h > 2J \\ -\frac{h}{2J}, & \text{für } h < 2J \end{cases} . \quad (4.22)$$

Es zeigt sich, dass der Verlauf der Magnetisierung den Erwartungen entspricht. Für den Grenzfall hoher Felder verschwindet die Magnetisierung in x-Richtung und die Magnetisierung in z-Richtung ist betragsmäßig maximal. Für den anderen Grenzfall niedriger Magnetfelder verschwindet dagegen M^z und M^x wird maximal.

4.2 Exakte Anregungsenergie in der polarisierten Phase

Die Energielücke für eine Anregung des Systems in D Dimensionen wurde für die Grenzfälle hoher bzw. niedriger Magnetfelder [6] perturbativ bestimmt zu:

$$h \ll J : \quad \frac{\Delta}{J} = 4 \frac{J}{h} - \frac{h}{2J} \quad (4.23)$$

$$h \gg J : \quad \frac{\Delta}{h} = 2 - 2 \frac{J}{h} - \frac{J^2}{h^2} . \quad (4.24)$$

Abbildung 4.2 macht deutlich, dass die so bestimmten Energielücken nicht an der gleichen Stelle schließen und daher nicht exakt sein können.

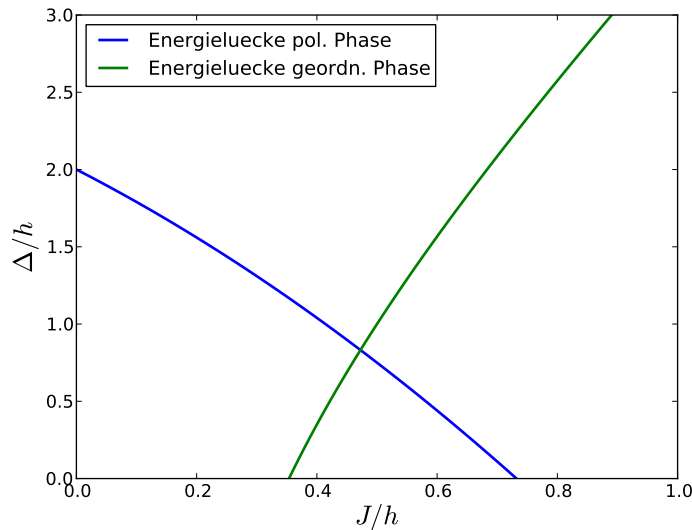


Abbildung 4.2: Perturbativ bestimmte Energielücke für beide Phasen in $D = \infty$

Ziel ist es nun zunächst die Anregungsenergie in der polarisierten Phase exakt zu bestimmen, sodass sie an der Stelle des Phasenübergangs bei $\frac{J}{h} = \frac{1}{2}$ auf Null abfällt. Hierzu ist es sinnvoll den Hamilton-Operator in D Dimensionen in Spinoperatoren zu verwenden:

$$H = 2h \sum_j S_j^z - \frac{4J}{D} \sum_{j,n} S_j^x S_{j+n}^x \quad . \quad (4.25)$$

Die Operatoren S^z und S^x haben dieselbe Wirkung auf die Spins, wie die entsprechenden Pauli-Matrizen, bis auf die Tatsache, dass sie die Eigenwerte $\pm \frac{1}{2}$ besitzen.

Es gilt:

$$S_j^z = a_j^\dagger a_j - S \quad , \quad (4.26)$$

$$S_j^x = \frac{1}{2}(S_j^+ + S_j^-) \quad , \quad (4.27)$$

wobei $S_j^+ = \sqrt{2S - a_j^\dagger a_j a_j}$ und $S_j^- = a_j^\dagger \sqrt{2S - a_j^\dagger a_j}$. Die a_j und a_j^\dagger sind die bosonischen Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren und erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad , \quad (4.28)$$

$$[a_i, a_j] = 0 \quad , \quad (4.29)$$

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad . \quad (4.30)$$

Im Limes $D = \infty$ verschwindet der Erwartungswert der Teilchendichte $a^\dagger a = n$ [1] und daher gilt:

$$S_j^+ \approx a_j \quad , \quad (4.31)$$

$$S_j^- \approx a_j^\dagger \quad . \quad (4.32)$$

Damit lässt sich der Hamilton-Operator schreiben als:

$$H = -Nh + 2h \sum_j n_j - \frac{J}{D} \sum_{j,n} (a_j a_{j+n} + a_j^\dagger a_{j+n}^\dagger + a_j a_{j+n}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+n}) \quad . \quad (4.33)$$

Die Fourier-Transformation des Hamilton-Operators ergibt sich nach der Vorschrift:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} a_k \quad (4.34)$$

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

Für die einzelnen Summanden lässt sich zeigen:

$$\begin{aligned}\sum_j n_j &= \sum_j a_j^\dagger a_j \\ &= \sum_k a_k^\dagger a_k \quad ,\end{aligned}\tag{4.36}$$

$$\sum_{j,n} (a_{j+n}^\dagger a_j + a_j^\dagger a_{j+n}) = \sum_k \sum_i (2 \cos k_i) a_k^\dagger a_k \quad ,\tag{4.37}$$

$$\sum_{j,n} (a_{j+n} a_j + a_j^\dagger a_{j+n}^\dagger) = \sum_k \sum_i \cos k_i (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \quad .\tag{4.38}$$

Damit transformiert sich der Hamilton-Operator zu:

$$H = -Nh + \sum_k \omega_k (a_k^\dagger a_k) + \sum_k \Gamma_k (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \quad ,\tag{4.39}$$

mit

$$\omega_k = 2h - \frac{2J}{D} \sum_i \cos k_i \quad ,\tag{4.40}$$

$$\Gamma_k = -\frac{J}{D} \sum_i \cos k_i \quad .\tag{4.41}$$

Zur Diagonalisierung wird eine Bogoliubov-Transformation [12] durchgeführt:

$$a_k = \cosh(\alpha_k) b_k + \sinh(\alpha_k) b_{-k}^\dagger\tag{4.42}$$

$$a_k^\dagger = \cosh(\alpha_k) b_k^\dagger + \sinh(\alpha_k) b_{-k} \quad .\tag{4.43}$$

Damit der transformierte Hamilton-Operator nun diagonal wird, müssen alle Terme der Form $b_k b_{-k}$ und $b_k^\dagger b_{-k}^\dagger$, also alle nicht teilchenzahlerhaltenden Terme, verschwinden. Daraus ergibt sich folgende Bedingung:

$$\sum_k (\omega_k \cosh(\alpha_k) \sinh(\alpha_k) + \Gamma_k \sinh^2(\alpha_k) + \Gamma_k \cosh^2(\alpha_k)) (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_{-k} b_k) \stackrel{!}{=} 0 \quad .\tag{4.44}$$

Es folgt:

$$\frac{1}{2} \omega_k \sinh(2\alpha_k) + \Gamma_k \cosh(2\alpha_k) = 0\tag{4.45}$$

und für den Winkel α_k ergibt sich schließlich:

$$\alpha_k = \frac{1}{2} \operatorname{arctanh} \left(-2 \frac{\Gamma_k}{\omega_k} \right) := \frac{1}{2} \operatorname{arctanh} \left(-\frac{B_k}{A_k} \right) \quad ,\tag{4.46}$$

mit $B_k = 2\Gamma_k$ und $A_k = \omega_k$.

Der entstehende Hamilton-Operator hat nun Diagonalgestalt:

$$\begin{aligned}
H = & -Nh + \sum_k [\omega_k (\cosh^2(\alpha_k) b_k^\dagger b_k + \sinh^2(\alpha_k) b_{-k} b_{-k}^\dagger) \\
& + \Gamma_k (\cosh(\alpha_k) \sinh(\alpha_k) b_k b_k^\dagger + \cosh(\alpha_k) \sinh(\alpha_k) b_{-k}^\dagger b_{-k}) \\
& + \cosh(\alpha_k) \sinh(\alpha_k) b_k^\dagger b_k \cosh(\alpha_k) \sinh(\alpha_k) b_{-k} b_{-k}^\dagger] \quad . \quad (4.47)
\end{aligned}$$

Unter Ausnutzung der bosonischen Kommutatorrelationen in Gleichung 4.28 und der Invarianz von H unter der Transformation $-k \rightarrow k$ lässt sich der Hamiltonian weiter umschreiben zu:

$$\begin{aligned}
H = & -Nh + \sum_k [(A_k \cosh(2\alpha_k) + B_k \sinh(2\alpha_k)) b_k^\dagger b_k \\
& + \frac{A_k}{2} (\cosh(2\alpha_k) - 1) + \frac{B_k}{2} \sinh(2\alpha_k)] \quad . \quad (4.48)
\end{aligned}$$

Es gilt:

$$\sinh(2\alpha_k) = \sinh\left(\operatorname{arctanh}\left(-\frac{B_k}{A_k}\right)\right) = -\frac{B_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}} := -\frac{B_k}{\Omega_k} \quad , \quad (4.49)$$

$$\cosh(2\alpha_k) = \cosh\left(\operatorname{arctanh}\left(-\frac{B_k}{A_k}\right)\right) = \frac{A_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}} = \frac{A_k}{\Omega_k} \quad (4.50)$$

und damit:

$$H = -Nh + \frac{1}{2} \sum_k (\Omega_k - A_k) + \sum_k \Omega_k b_k^\dagger b_k \quad . \quad (4.51)$$

Hierbei stellt der Term $\frac{1}{2} \sum_k (\Omega_k - A_k)$ eine Energiekorrektur dar und ist, aufgrund der Summation, k -unabhängig.

Für die exakte Dispersion in D Dimensionen folgt daher

$$\Omega_k = \sqrt{A_k^2 - B_k^2} = \sqrt{\omega_k^2 - 4\Gamma_k^2} = \sqrt{4h^2 - 8\frac{hJ}{D} \sum_{i=1}^D \cos k_i} \quad (4.52)$$

und die Energielücke $\Delta = \Omega_{k=0}$ berechnet sich zu:

$$\frac{\Delta}{h} = \frac{1}{h} \sqrt{4h^2 - 8hJ} = 2\sqrt{1 - 2\frac{J}{h}} \quad , \quad (4.53)$$

welche, wie erwartet, am Phasenübergang bei $\frac{J}{h} = \frac{1}{2}$ auf Null abfällt (Abbildung 4.3).

Aus der Entwicklung der in Gleichung 4.53 bestimmten Energielücke in Ordnungen von J/h :

$$\frac{\Delta}{h} = 2 - 2\frac{J}{h} - \frac{J^2}{h^2} + \mathcal{O}\left(\frac{J^3}{h^3}\right) \quad (4.54)$$

ergibt sich exakt das Ergebnis der perturbativen Rechnung zur Energielücke in $D = \infty$. Die Ergebnisse sind also offensichtlich konsistent.

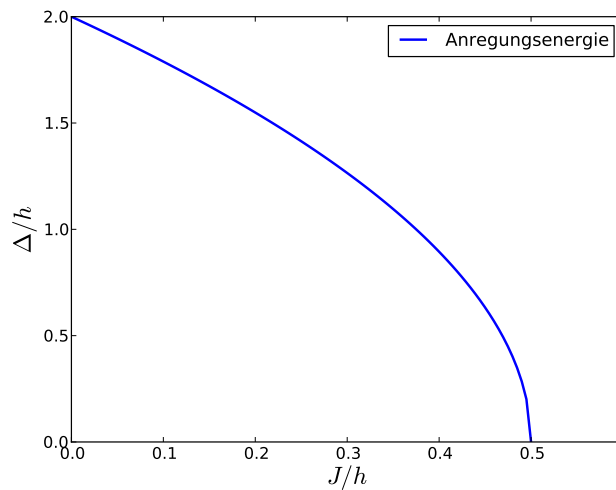


Abbildung 4.3: Exakte Energielücke für $h > 2J$ in ∞ Dimensionen

Die zunächst nur perturbativ berechnete Energielücke ließ sich also für den Fall unendlich vieler Dimensionen analytisch herleiten. Das Ergebnis zeigt, dass der Phasenübergang auch bei $D = \infty$ nicht verschwindet.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Untersuchung der polarisierten Phase des transversalen Ising-Modells mit ferromagnetischer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung auf dem hyperkubischen Gitter hat in dieser Arbeit einige interessante Aspekte gezeigt.

Neben der perturbativen Berechnung von Grundzustandsenergie E_0 und Energielücke Δ in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie in beliebigen Dimensionen ließen sich diese Größen für den Grenzfall $D = \infty$ analytisch bestimmen. Die Ergebnisse zeigten die erwartete Übereinstimmung und eine spinwellentheoretische Berechnung der Anregungsenergie in der polarisierten Phase ergab ein Schließen der Energielücke bei $h = 2J$, was der Stelle des Phasenübergangs im Modell für $D = \infty$ entspricht. Dieser ließ sich auch im Grenzfall unendlicher Dimensionen noch als Phasenübergang zweiter Ordnung nachweisen (Abbildung 5.1). Auch durch die Berechnung der Magnetisierung in beiden Phasen, ließen sich die jeweiligen Grundzustände im Grenzfall reproduzieren, wodurch die Ergebnisse zusätzlich verifiziert werden.

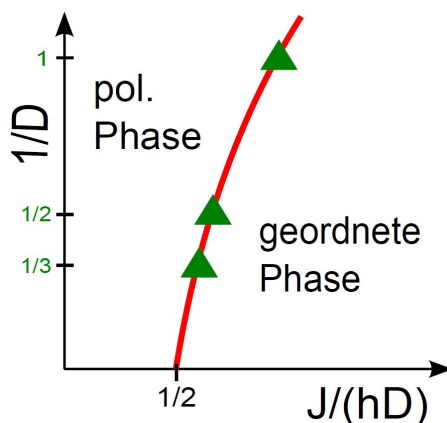


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des gefundenen Phasenübergangs (rot) in $\frac{1}{D}$ für verschiedene Verhältnisse von Kopplungsstärke J und Magnetfeld h

Weiterführende Untersuchungen hätten nun noch auf eine analytische Berechnung der Anregungsenergie ausgehend von der geordneten Phase bei $J \gg h$ abzielen können, um zu zeigen, dass die Energielücke auch von dieser Seite bei $J = 2h$ schließt. Das Problem ist, dass der im Ansatz verwendete Produktzustand aus Spin-Up und Spin-Down zunächst hätte transformiert werden müssen auf die Grundzustände $|\rightarrow\rangle$ und $|\leftarrow\rangle$ der geordneten Phase. Es ist wahrscheinlich, dass der so transformierte Hamilton-Operator nicht mehr der Standardform für eine Bogoliubov-Transformation genügt, weshalb ein anderer Weg zur Berechnung der Energielücke in der geordneten Phase hätte gefunden werden müssen.

Quellenverzeichnis

- [1] Darshan G. Joshi, Kris Coester, Kai P. Schmidt, and Matthias Vojta. Non-linear bond-operator theory and $1/d$ expansion for coupled-dimer magnets I: Paramagnetic phases. to be published.
- [2] Ernst Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31.1:S.253–258, 1925.
- [3] Lars Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, 65:117–149, 1944.
- [4] Bikas K. Chakrabarti, Amit Dutta, and Parongama Sen. *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*. Springer, 1996.
- [5] Henk W. J. Blöte and Youjin Deng. Cluster monte carlo simulation of the transverse ising model. *Physical Review E* 66, 066110, 2002.
- [6] Julia Röchner. Störungstheorie in beliebigen Dimensionen. *Bachelorarbeit*, 2014.
- [7] Kai P. Schmidt. Festkörpertheorie II. Vorlesungsskript, TU-Dortmund, WS 2008/2009.
- [8] Pierre Pfeuty. The One-Dimensional Ising Model with a Transverse Field. *Annals of Physics*, 1970.
- [9] X-H He, C J Hamer, and J Oitmaa. High-Temperature series Expansions for the $(2+1)$ -dimensional Ising model. *J. Phys. A: Math. Gen.* 23, 1989.
- [10] Matthias Vojta. Private Communication.
- [11] E.M. Lifschitz. *Lehrbuch der theoretischen Physik V*. Akademie Verlag, Berlin, 1970.
- [12] Dominik Ixert. Klassischer Limes und Spinwellentheorie für die Mottphase des Hubbardmodells auf dem Dreiecksgitter. *Bachelorarbeit*, 2010.

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei Kai P. Schmidt für die exzellente Betreuung bei der Erstellung dieser Bachelorarbeit bedanken. Ich danke ebenfalls Kris Coester und Michael Powalski, die ständig ein offenes Ohr für Probleme und Fragen hatten. Vielen Dank auch Dennis Zimmermann, für seine Hilfe beim Lösen technischer Probleme und Julia Röchner, für die erfolgreiche Zusammenarbeit. Zuletzt danke ich meinen Eltern für die Jahre der Unterstützung während der Schul- und Studienzeit.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel "Physik der polarisierten Phase des Ising-Modells im transversalen Feld in beliebigen Dimensionen" 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