Störungstheoretische Untersuchungen von SU(2) Spinquantenketten

von

Inga Daase

Diplomarbeit in Physik
angefertigt im

Physikalischen Institut der Universität Bonn

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen-Friedrich-Wilhelms Universität

Bonn

im August 1995

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Referent:	Prof. Dr. G. v. Gehlen
Korreferent:	Prof. Dr. R. Flume

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Isotrope Phasenübergänge 2. Ordnung lassen sich durch konforme Quantenfeldtheorien beschreiben. Dies beruht auf der 1970 von Polyakov aufgestellten Hypothese, daß Systeme der statistischen Mechanik an Phasenübergängen 2. Ordnung nicht nur skaleninvariant, sondern sogar konform invariant sind [1]. Die Konsequenzen dieser Hypothese sind besonders weitreichend für zweidimensionale Systeme: in diesem Fall ist die konforme Gruppe unendlich dimensional (sie wird erzeugt von allen holomorphen und antiholomorphen Koordinatentransformationen) und reicht aus, um alle Korrelationsfunktionen bis auf Normierung festzulegen [2] [3]. Dies erlaubt die Einteilung der Modelle, entsprechend ihrer Symmetrie und der Raumdimension, in Universalitätsklassen. Besonders interessant sind dabei die sogenannten minimalen Modelle, die durch die folgende zentrale Ladung c charakterisiert sind:

$$c = 1 - 6\frac{(p - p')^2}{pp'} \tag{1.1}$$

wobei p und p' teilerfremde, positive ganze Zahlen sind. Falls außerdem $p-p' = 1$ und $p' \geq 3$ gilt, so existieren unitäre Darstellungen der Virasoro-Algebra [4]. Eine weitere Klasse interessanter Modelle sind die Z_n-symmetrischen parafermionischen Fateev-Zamolodchikov Modelle [4].
Es ist also wünschenswert, zweidimensionale statistische Modelle, die sich durch die Transfermatrixmethode auf eindimensionale Spinquantenketten reduzieren lassen [5] [6], zu finden, deren Phasenübergänge 2. Ordnung die obigen Universalitätsklassen realisieren. Spinquantenketten sind mit finite-size-Rechnungen, mean-field Approximationen und störungstheoretischen Methoden gut zugänglich [7] [8]. Huse [9] erkannte, daß sowohl die mininalen, als auch die parafermionischen Modelle durch kritische Punkte der integrablen RSOS-Modelle von Andrews, Baxter und Forrester realisiert werden. [10] [11] [12]
Im Falle der Z_n symmetrischen parafermionischen Theorien lasen sich jeweils für alle n einfache Quantenketten angeben, so erhält man z.B. für $n = 2$ das Ising- und für $n = 3$ das Pottsmodell. [13] Für die (A_{m-1}, A_m) minimalen Modelle (d.h. $p = m - 1$ und $p' = m$ und diagonale Zustandssumme) ist die Situation schwieriger: Geht man zur Konstruktion der Modelle von den integrablen RSOS-Modellen aus, so erhält man Quantenketten von komplizierter Struktur.
Ein alternativer Ansatzpunkt ist, ausgehend von Symmetrieprinzipien, Quantenketten zu konstruieren, die multikritische Punkte erreichen und dabei eine möglichst einfache Struktur aufweisen. Die Konstruktionsmöglichkeiten werden durch die Forderung nach Z_2-Symmetrie nur sehr wenig eingeschränkt. Einen anderen Anhaltspunkt liefert der Versuch von Blume, Emery und Griffith [14] das experimentelle Verhalten von $He^3 - He^4$-Flüssigkeitsgemischen durch 2-dimensionale Modelle zu beschreiben. Es gelang diesen, das Suprafluide- und Phasenseparationsverhalten des Gemisches in wesentlichen Zügen durch ein Spin 1 Modell zu simulieren. Aus diesem abgeleitete SU(2) Spin-Quantenketten sind insbesondere für $s = 1$ und $s = 3/2$ als Blume-Emery-Griffith- oder als deren Spezialfall (mit nur einem nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterm) als Blume-Capel-Modelle bekannt und mit finite-size-Methoden, im mean-field-Ansatz und mit Renormierungsgruppen-Rechnungen behandelt worden.[7] [8] [15] [16] [17] [18] [19] [20] [21] [22] [23]
Das Ziel (A_{m-1}, A_m)-minimale Modelle zu realisieren wurde von D. Sen [24] verfolgt, der zu

diesem Zwecke folgende Spin-Quantenkette vorschlägt:

$$H_Q = \sum_{i=1}^{N} \Big[\frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 + \gamma S_{ix} + \sum_{n=1}^{[S]} a'_{2n} S_{iz}^{2n}\Big] \tag{1.2}$$

wobei S_x und S_z SU(2)-Spin-Operatoren sind und S_z diagonal gewählt werde. Das Modell ist invariant unter der Transformation

$$S_z \mapsto -S_z, \qquad S_x \mapsto S_x \qquad S_y \mapsto -S_y \tag{1.3}$$

und zeichnet sich durch eine kleine Anzahl von Parametern und eine einfache Struktur der nächste-Nachbar-Wechselwirkung aus.
Das Modell ist nicht integrabel, kann aber in Störungstheorie behandelt werden. Die Entwicklung $\sum a_{2n} S_{iz}^{2n}$ ist dabei gerade so gewählt, daß man jeweils die minimale Anzahl Parameter zur Verfügung hat, um die Ununterscheidbarkeit von $(2s+1)$-Phasen zu gewährleisten. Für $\gamma = a_{2n} = 0, \quad \{n = 1..[s]\}$ ist der Grundzustand der Quantenkette $(2s+1)$-fach entartet. Ziel der Rechnungen ist es nun, die Koeffizienten a_{2n} als Funktion von γ so zu bestimmen, daß diese Entartung auch für $\gamma \neq 0$ aufrecht erhalten bleibt. Dazu verwenden wir, D. Sen folgend, eine Störungsentwicklung des Hamililtons H_Q in γ, einer Tieftemperaturentwicklung entsprechend, und eine Potenzreihenentwicklung für die Koeffizienten, die die Phasengrenze festlegt.
Betrachtet man zunächst den klassischen Fall mit $\gamma = 0$ und z.B. $a_2 \neq 0$, während $a_4 = a_6 = \ldots = 0$ gewählt seien, so ist H_Q direkt diagonalisiert und der Zustand niedrigster Energie mit $< S_z >= m$ läßt sich sofort ablesen: [13]

$$\varepsilon = a_2 m^2 \tag{1.4}$$

Es gilt aber nun für die Grundzustandsenergie mit $a_2 > 0$:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{4} a_2 \qquad \text{für s halbzahlig} \tag{1.5}$$

$$\varepsilon_0 = 0 \qquad \text{für s ganzzahlig} \tag{1.6}$$

und mit $a_2 < 0$

$$\varepsilon_0 = a_2 s^2. \tag{1.7}$$

Diese Überlegungen zeigen, daß wir uns auf einer Phasenübergangskurve 1. Ordnung befinden, da die Grundzustandsenergie nicht kontinuierlich variiert. Die Behauptung von D. Sen ist nun, daß diese Kurve kontinuierlich in einen Phasenübergang 2. Ordnung einmündet und somit multikritische Punkte erreicht werden, die passende Kandiaten zur Realsisierung einer (A_{m-1}, A_m)-KQFT wären [24]. Ziel dieser Arbeit ist es, diese Behauptung zu überprüfen, indem die Störungsentwicklung bis zur Ordung γ^6 weiterverfolgt wird. Zur Lokalisierung des multikritischen Punktes auf der Phasengrenze, müssen Ordnungsparameter bestimmt werden, um die Ununterscheidbarkeit von $(2s+1)$ Phasen im Falle des Spin s-Modells überprüfen zu können. Zu diesem Zweck verwenden wir den Erwartungswert von S_z, auch als Magnetisierung bezeichnet. Diesen erhalten wir, indem das obige Modell um ein longitudinales Magnetfeld erweitert wird.

2 Theorie der Phasenübergänge

Phasenübergänge sind in der Natur weit verbreitete Phänomene, die so unterschiedliche Erscheinungsformen haben können wie der aus dem Alltag wohlvertraute Übergang zwischen den Aggregatzuständen des Wassers, aber auch weniger alltägliche Formen wie der Übergang vom flüssigen zum supraflüssigen Zustand oder vom paramagnetischen zum ferromagnetischen Verhalten in Festkörpern. [25] [26] Ungeachtet dieser so unterschiedlichen Systeme besitzen Phasenübergänge Gemeinsamkeiten, die theoretische Beschreibungen erlauben unabhängig von einer Vielzahl konkreter Systemparameter; dies resultiert in einer Einteilung in Universalitätsklassen. Phasenübergänge sind stets durch Veränderung der Symmetrieeigenschaften oder durch Zu- oder Abnahme des Grades der Ordnung, die in einem System herrscht, charakterisiert. Dies legt die Definition von Ordnungsparametern nah, die die Unterscheidung verschiedener Phasen erlauben. Phasendiagramme resultieren aus der Darstellung dieser Ordnungsparameter als Funktion äußerer Systemparamter wie z.B. Temperatur, Druck oder Magnetfeld. Man unterscheidet grundsätzlich zwei verschiedene Arten von Phasenübergängen:

1.) Phasenübergänge 1.Ordnung:

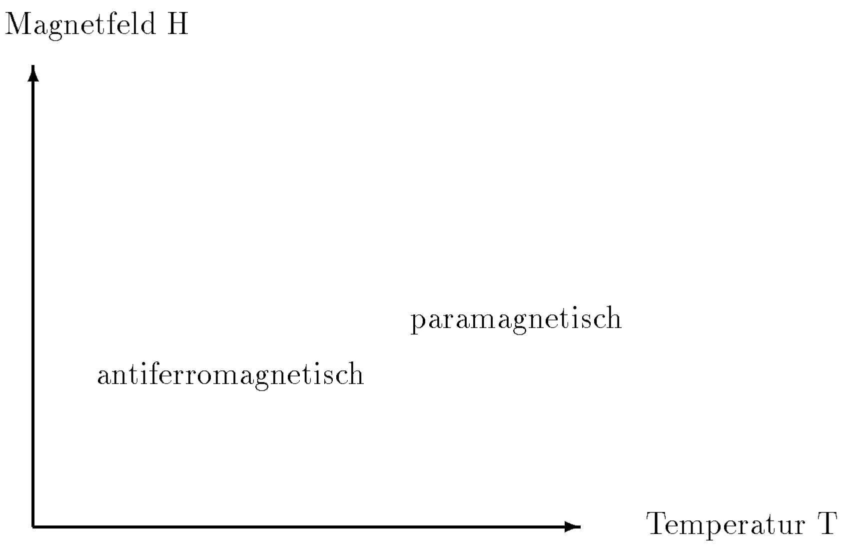
Diese sind durch eine Diskontinuität des Ordnungsparameters beim Überschreiten der Phasengrenze charakterisiert.

2.) Phasenübergänge 2.Ordnung:

Diese weisen ein kontinuierliches Verhalten des Ordnungsparameters auf, d.h. die Phasen die eine Phasengrenze 2. Ordnung trennt, sind nicht qualitativ verschieden. Solche Phasengrenzen werden auch als Linien von kritischen Punkten bezeichnet.

Der Übergangspunkt von einer Phasengrenze 1.Ordnung zu einer solchen von 2. Ordnung wird oft als trikritischer Punkt bezeichnet. Ursprünglich resultiert diese Bezeichnungsweise aus der Beobachtung, daß am trikritischen Punkt drei Phasen ununterscheidbar werden. Diese Definitionen stimmen in einigen Fällen überein und sollen durch das folgende Beispiel illustriert werden:

Phasendiagramm (schematisch)



Phasengrenze 1. Ordnung

Phasengrenze 2. Ordnung

trikritischer Punkt

Einen theoretischen Ansatz zur Beschreibung von Phasenübergängen [25] liefert die Ginzburg-Landau-Theorie, die die Zustandssumme als Funktionalintegral über alle moglichen räumlichen Variationen des Ordnungsparameterfeldes schreibt. Aufgrund der Universalität ist es möglich einen solchen feldtheoretischen Ansatz zu verwenden, da das kritische Verhalten für diskrete und kontinuierliche Variabeln gleich sein sollte. Sei nun $M(x)$ ein ortsabhängiges Ordnungsparameterfeld, dann gilt für die Zustandssumme Z:

$$Z = \int D(M(x))exp\Big\{ - \beta \int F_L(M(x))dx \Big\} \tag{2.1}$$

wobei $F_L(M(x))$ die lokale freie Energiedichte und $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur ist. Die Auswahl von F_L entscheidet über den physikalischen Inhalt des Problems. Oft verwendet man einen Potenzreihenansatz für F_L mit Potenzen des Ordnungsparameters $M(x)$ und berücksichtigt zusätzlich Terme, die den Gradienten von $M(x)$ enthalten.

Die Landau-Theorie [15] [25] liefert ein Näherungsverfahren zu diesem Ansatz: statt die Summe über alle Variationen der Feld-Variable $M(x)$ zu bilden, wird diese durch den maximalen Beitrag zum Integranden ersetzt. Dieser ist dardurch gegeben, daß die Gradient-Terme verschwinden, d.h. der Ordnungsparameter wird als ortsunabhängig angesetzt. Auf diese Weise erhält man eine Fluktuationen vernachlässigende mean-field- Näherung. Als Konsequenz der Landau-Theorie ergeben sich sogennante klassische Werte für kritische Exponenten. Die kritischen Exponenten legen das (singuläre) Verhalten thermodynamischer Funktionen wie z.B. der Magnetisierung, der Suszeptibilität oder der spezifischen Wärme, aber auch die Divergenz der Korrellationslänge in der Nähe des Phasenübergangs fest. Es gilt z.B. mit $\Delta T := T - T_C$:

$$M \propto |\Delta T|^\beta \tag{2.2}$$

$$C \propto \frac{1}{|\Delta T|^\alpha} \tag{2.3}$$

Für die Korrellationslänge ξ gilt:

$$\xi \propto \frac{1}{|\Delta T|^\nu} \tag{2.4}$$

Wobei die Landau-Theorie z.B. folgende klassische Werte liefert:

$$\beta = 1/2 \tag{2.5}$$

$$\alpha = 0 \tag{2.6}$$

$$\nu = 1/2 \tag{2.7}$$

Die kritischen Exponenten sind nicht unabhängig voneinander, sondern sie sind durch scaling-laws verknüpft. Die klassischen Werte erfüllen diese Relationen, mit Ausnahme des Josephson-Gesetzes, das die Raumdimension d enthält:

$$\nu d = 2 - \alpha \tag{2.8}$$

Dieses Gesetz ist nur für $d = 4$ erfüllt. Dieser Zusammenhang zwischen der Anwendbarkeit der Landau-Theorie und der Raumdimension führt auf das Ginzburg-Kriterium, das eine Grenzdimension angibt, unterhalb derer in einer kritischen Region nichtklassische Exponenten gemessen werden sollten. Diese Grenzdimension ist für kritische Punkte gleich 4, für trikritische Punkte gleich 3. Nähere Untersuchungen ergeben, daß im dreidimensionalen Ortsraum die trikritischen Exponenten durch logertihmische Korrekturen an die zu erwartenden experimentellen Ergebnisse angepaßt werden müssen. Diese Korrekturen sind jedoch im allgemeinen sehr klein. Es ist verständlich, daß für niedrige Dimensionen die Landau-Vorhersagen unzutreffend sind, da Fluktuationen vernachlässigt werden, die gerade für kleine Dimensionen eine entscheidende Rolle spielen.

Die scaling-Relationen zwischen den kritischen Exponenten lassen sich ableiten, indem man für die Gibbsche freie Energie die Homogenitätshypothese anwendet: Diese besagt, daß sich $G(T, H)$, wobei T die Temperatur und H ein äußeres Magnetfeld sind, in der Umgebung von T_c in einen regulären und einen singuläre Anteil zerlegen läßt. Für den singulären Term gilt, daß dieser eine homogene Funktion vom Grad $(2 - \alpha)$ der Variablen sein soll, d.h.mit

$$t := \frac{T - T_c}{T_c} \tag{2.9}$$

gilt:

$$G_s \propto |t|^{2-\alpha} f_\pm\left(\frac{H}{|t|^\Delta}\right) \tag{2.10}$$

wobei f_+für $t > 0$ und f_- für $t < 0$ gilt.
Aus dieser Hypothese lassen sich Schlußfolgerungen ziehen auf das Verhalten solcher thermodynamischer Größen, die sich als Ableitungen von $G(T, H)$ nach den Variablen schreiben lassen (z.B. die Magnetisierung, die Suszeptibilität oder die spezifische Wärme). Auch für Zustandsgleichungen, d.h. für Beziehungen der Form $M = f(T, H)$ läßt sich eine homogene Schreibweise finden:

$$\frac{M}{|t|^\beta} = g_\pm\left(\frac{H}{|t|^{\beta\Delta}}\right) \tag{2.11}$$

Wobei die Vorzeichenindizes analoge Bedeutung haben.
Dies legt die Einführung neuer Variabeln nah, der sogennanten scaling- fields, die Linearkombinationen aus den ursprünglichen Variabeln T und H sind und die obige Vorzeichenunterscheidung überflüssig machen.
Die Verbindung von makroskopischem (singulärem) Verhalten und dessen mikroskopischen Grundlagen stellt das Fluktuations - Dissipationstheorem her. Dieses Beschreibt die Antwort z. B. der Suszeptibilität auf Störungen durch ein schwaches Feld H, das an die Magnetisierung ankoppelt:

$$\chi = \beta \int_\Omega dx \Big\{ < M(0)M(x) > - < M(0) >< M(x) > \Big\} \tag{2.12}$$

Wendet man die Homogenitätshypothese auf solche Korrellationsfunktionen an, so erhält man, unter Verwendung des Fluktuations - Dissipationstheorems, einen Zusammenhang zwischen kritischen Exponenten zu makroskopischen und zu mikroskopischen Größen. (Fisher's scaling-law)

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \tag{2.13}$$

Wobei η das Verhalten der Korrellationsfunktion $\Gamma(R)$ bestimmt:

$$\Gamma(R) \propto \frac{1}{R^{d-2+\eta}} \tag{2.14}$$

Die Systemeigenschaften werden also durch die Reichweite von Korrellationsfunktionen, d.h. durch die Korrellationslänge ξ, bestimmt. Falls diese divergiert, so existieren Fluktuationen aller Größenordnungen; das System wird skaleninvariant. Skaleninvarianz ist charakteristisch für Phasenübergänge 2.Ordnung. [25] [26]

3 Störungsrechnung bis zur 6. Ordnung

3.1 Einführung des Modells

Der Hamiltonian der Spin-Quantenkette ,mit dem wir uns im folgenden beschäftigen werden, lautet:

$$H_Q = \sum_{i=1}^{N} \Big[\frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 + \gamma S_{ix} + \sum_{n=1}^{[S]} a'_{2n} S_{iz}^{2n}\Big] \tag{3.1}$$

Die Spin -Operatoren S_z und S_x sind definiert durch ihre Wirkung auf die Drehimpulseigenzustände, die mit $\mid s, m >$ bezeichnet seien.

$$S_z \mid s, m >= m \mid s, m > \tag{3.2}$$

D.h. S_z ist diagonal gewählt.

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \tag{3.3}$$

Wobei S_+ und S_- Auf- bzw. Absteigeoperatoren sind, d.h.

$$S_\pm \mid s, m >= \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} \mid s, m \pm 1 > \tag{3.4}$$

Dieses Modell, so vermutet D. Sen [24], realisiert für geeignete Parameter $\gamma*$ und $a_{2n}*$ $(2s+1)$-fache multikritische Theorien. Diese multikritischen Punkte sollen durch Störungstheorie in γ ermittelt werden. Der Ausgangspunkt ist dabei der Grundzustand, in dem alle Spins 'parallel' ausgerichtet sind, also alle die gleiche m-Quantenzahl besitzen; unsere Rechnung entspricht also einer Tieftemperaturentwicklung. Dieser Zustand ist $(m = 2s + 1)$-fach entartet. Durch Anwendung des Operators S_x wird Unordnung in das System gebracht, indem einzelne Spins eine von m abweichende Quantenzahl erhalten. Die Entartung des Grundzustandes soll aber auch für diese Eigenzustände mit $\gamma \neq 0$ gelten. Zu diesem Zweck werden die Koeffizienten a'_{2n} so angepaßt, das die Entartung aufrecht erhalten bleibt. Auf diese Weise sollten am kritischen Punkt m Phasen ununterscheidbar werden. Wir können uns für die gesammte Rechnung auf einen Ausgangsgrundzustand mit beliebiger aber fester m-Quantenzahl beschränken, so daß wir nichtentartete Störungstheorie anwenden dürfen.

Um nun die Eigenwerte mit Hilfe von Störungstheorie zu berechnen, teilen wir H_Q wie folgt auf: wir fassen den nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterm als ungestörten Operator H_0 auf. [27]

$$H_0 = \sum_i \frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 \tag{3.5}$$

Für das Störpotential $\tilde{V}$, das aus einem diagonalen Anteil V' und einem nichtdiagonalen Term V besteht, gilt dann:

$$\tilde{V} = V + V' \tag{3.6}$$

mit

$$V_i = S_{ix} \tag{3.7}$$

und

$$V_i' = \sum_{n=1}^{[S]} a_{2n}' S_{iz}^{2n} \tag{3.8}$$

Die Phasengrenze (zu einem Phasenübergang 1. Ordnung gehörend) parametrisieren wir durch γ und betrachten die a_{2n}' als Funktionen von γ. Da für $\gamma = 0$ gelten soll: $a_{2n}' = 0$, verwenden wir den folgenden Ansatz:

$$a_{2n}' = \sum_{j=0}^{\infty} a_{2n}^{(2j)} \gamma^{2j+1} \tag{3.9}$$

D.h.

$$\begin{aligned}
a_2' &= a_2^{(0)}\gamma + a_2^{(2)}\gamma^3 + a_2^{(4)}\gamma^5 + \dots & (3.10)\\
a_4' &= a_4^{(0)}\gamma + a_4^{(2)}\gamma^3 + a_4^{(4)}\gamma^5 + \dots & (3.11)\\
a_6' &= a_6^{(0)}\gamma + a_6^{(2)}\gamma^3 + a_6^{(4)}\gamma^5 + \dots & (3.12)
\end{aligned}$$

3.2 Berechnung der Eigenwerte des ungestörten Anteils H_0

Zunächst berechnen wir nun die Eigenwerte des ungestörten HamiltoniansH_0. Zur Abkürzung wird im Folgenden bei der Bezeichnung der Zustände $\mid s, m >$ die s-Quantenzahl weggelassen, da diese durch die Operatoren S_x und S_z, die in H_Q auftreten, nicht geändert wird. Der Grundzustand, d.h. derjenige Zustand, in welchem alle Spins parallel ausgerichtet sind, sei nun mit $\mid n >$, der zugehörige Eigenwert mit ε_0 , bezeichnet. Damit erhält man:

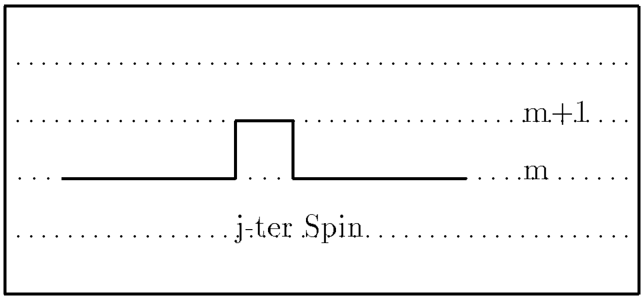
$$\mid n > := \mid s_1 = m, \dots, s_N = m > \tag{3.13}$$

$$
\begin{aligned}
H_0 \mid n > &= \varepsilon_0 \mid n > && (3.14)\\
&= \sum_i \frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 \mid n > && (3.15)\\
&= 0 \mid n >\\
\Rightarrow \varepsilon_0 &= 0
\end{aligned}
$$

Das Potential $V_i = S_{ix}$ klappt den i-ten Spin um, d.h. die m-Quantenzahl des i-ten Spins erhöht oder erniedrigt sich um eins. Ein solcher 1-Flip Zustand sei mit $\mid m >$ bezeichnet:

$$
\mid m >:= \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \mid m, \dots s_j = m \pm 1, \dots m > \qquad (3.16)
$$

Wobei die λ_j komplexe Koeffizienten sind. Zur besseren Übersicht sollen die Spin-Konfigurationen graphisch veranschaulicht werden (ähnlich wie in Ref.[6]). Die Darstellung bezieht sich dabei stets auf das obere Vorzeichen, das in der Definition der Zustände auftaucht; die andere Möglichkeit der Spin-Flips ergibt sich durch Spiegelung des Graphen an der m-Linie.

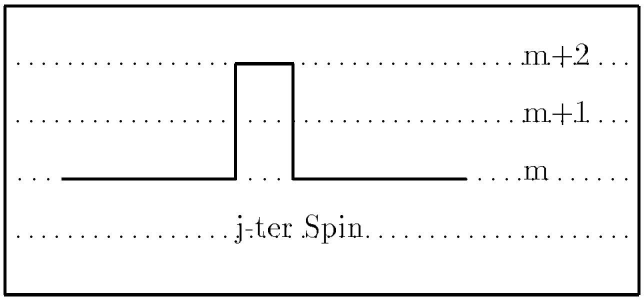


Der Eigenwert zu $\mid m >$ werde mit ε_m bezeichnet und berechnet sich wie folgt:

$$
\begin{aligned}
H_0 \mid m > &= \varepsilon_m \mid m > && (3.17)\\
&= \sum_{i,j} \frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 \lambda_j \mid m, \dots s_j = m \pm 1, \dots m > && (3.18)\\
&= \sum_j \frac{1}{2}[[m - (m \pm 1)]^2 + [(m \pm 1) - m]^2] \lambda_j \mid m, \dots s_j = m \pm 1, \dots m >\\
&= 1 \mid m >\\
\Rightarrow \varepsilon_m &= 1
\end{aligned}
$$

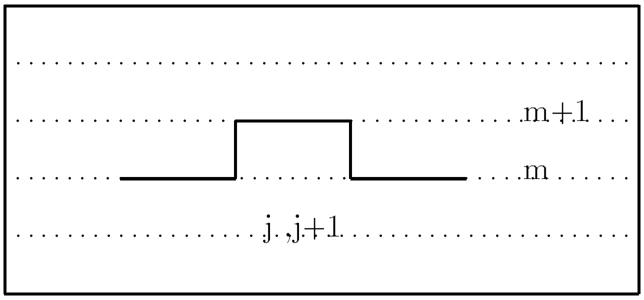
Als nächstes berechnen wir die Eigenwerte ε_j, die zu den 2-Flip-Zuständen gehören. Diese besitzen unterschiedliche Energien, entsprechend der relativen Lage der Spin-Flips. Die verschiedenen Möglichkeiten sind im folgenden aufgeführt:

$$
\mid j_1 >= \sum_j \lambda_j \mid m, \dots s_j = m \pm 2, \dots m > \qquad (3.19)
$$



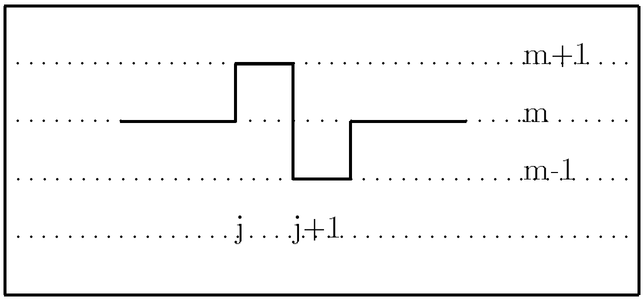
$$\begin{aligned} H_0 \mid j_1 > &= \varepsilon_{j_1} \mid j_1 > && (3.20) \\ \varepsilon_{j_1} &= 4 && (3.21) \end{aligned}$$

$$\mid j_2 >= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \pm 1 \ldots m > \qquad (3.22)$$



$$\begin{aligned} H_0 \mid j_2 > &= \varepsilon_{j_2} \mid j_2 > && (3.23) \\ \varepsilon_{j_2} &= 1 && (3.24) \end{aligned}$$

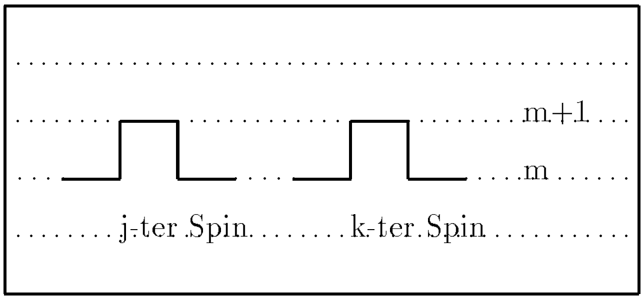
$$\mid j_3 >= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \mp 1 \ldots m > \qquad (3.25)$$



$$\begin{aligned} H_0 \mid j_3 > &= \varepsilon_{j_3} \mid j_3 > && (3.26) \\ \varepsilon_{j_3} &= 3 && (3.27) \end{aligned}$$

$$\mid j_4 >= \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \pm 1, \ldots m > \tag{3.28}$$

Wobei $k \neq j \pm 1$ und $k \neq j$

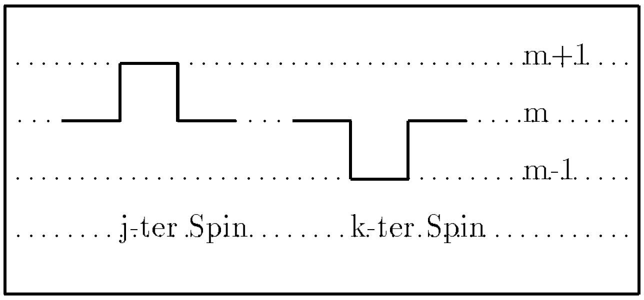


$$H_0 \mid j_4 > \; = \; \varepsilon_{j_4} \mid j_4 > \tag{3.29}$$

$$\varepsilon_{j_4} \; = \; 2 \tag{3.30}$$

$$\mid j_5 >= \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \mp 1, \ldots m > \tag{3.31}$$

Wobei $k \neq j \pm 1$ und $k \neq j$

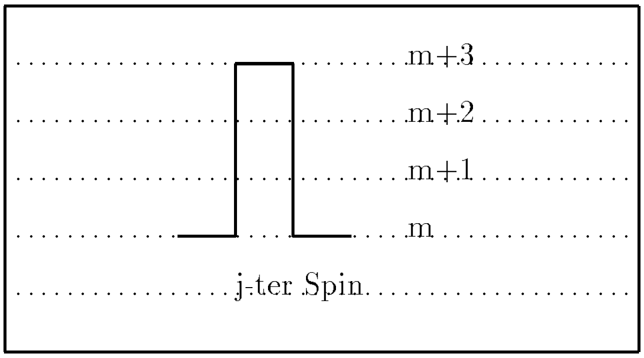


$$H_0 \mid j_5 > \; = \; \varepsilon_{j_5} \mid j_5 > \tag{3.32}$$

$$\varepsilon_{j_5} \; = \; 2 \tag{3.33}$$

In gleicher Weise lassen sich die 3-Flip Zustände behandeln:

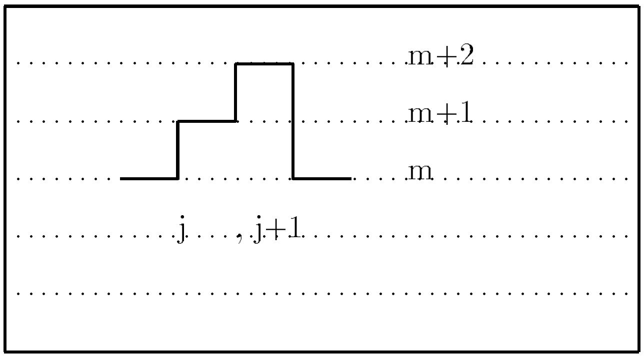
$$\mid p_1 >:= \sum_{j} \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 3, \ldots m > \tag{3.34}$$



$$H_0 \mid p_1 > \;=\; \varepsilon_{p_1} \mid p_1 > \tag{3.35}$$

$$\varepsilon_{p_1} \;=\; 9 \tag{3.36}$$

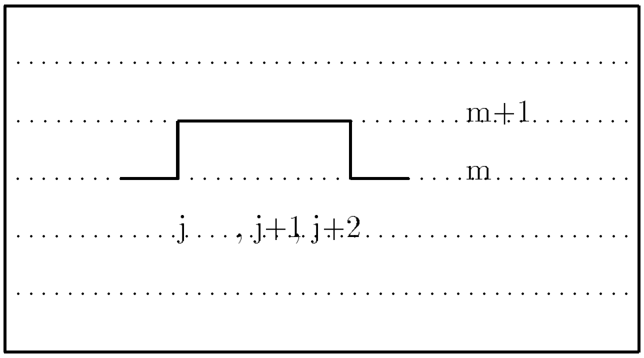
$$\mid p_2 >:= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \pm 2, \ldots m > \tag{3.37}$$



$$H_0 \mid p_2 > \;=\; \varepsilon_{p_2} \mid p_2 > \tag{3.38}$$

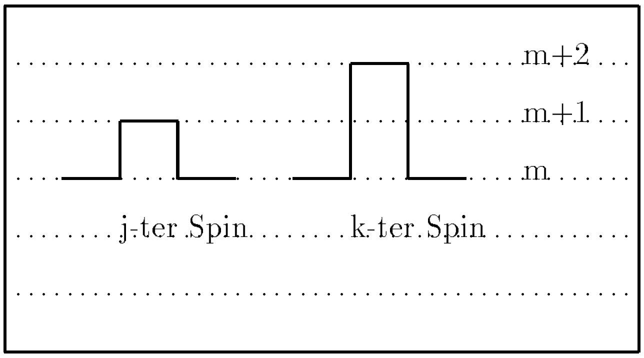
$$\varepsilon_{p_2} \;=\; 3 \tag{3.39}$$

$$\mid p_3 >:= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \pm 1 s_{j+2} = m \pm 1, \ldots m > \tag{3.40}$$



$$\begin{aligned} H_0 \mid p_3 > &= \varepsilon_{p_3} \mid p_3 > &(3.41)\\ \varepsilon_{p_3} &= 1 &(3.42)\end{aligned}$$

$$\mid p_4 > := \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \pm 2, \ldots m > \tag{3.43}$$

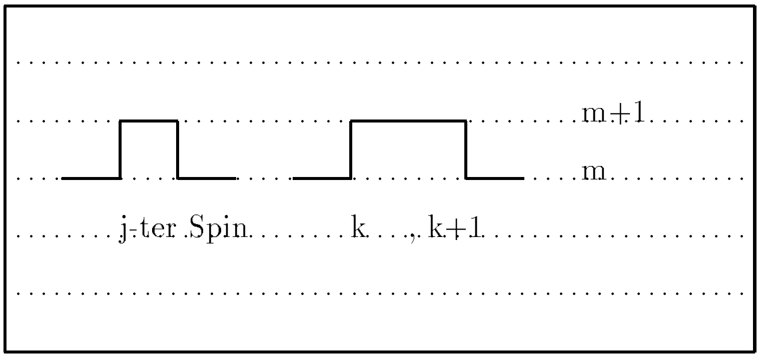


$$\begin{aligned} H_0 \mid p_4 > &= \varepsilon_{p_4} \mid p_4 > &(3.44)\\ \varepsilon_{p_4} &= 5 &(3.45)\end{aligned}$$

$$\mid p_5 > := \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \mp 1, \ldots s_k = m \pm 2, \ldots m > \tag{3.46}$$

$$\begin{aligned} H_0 \mid p_5 > &= \varepsilon_{p_5} \mid p_5 > &(3.47)\\ \varepsilon_{p_5} &= 5 &(3.48)\end{aligned}$$

$$\mid p_6 > := \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \pm 1, s_{k+1} = m \pm 1 \ldots m > \tag{3.49}$$

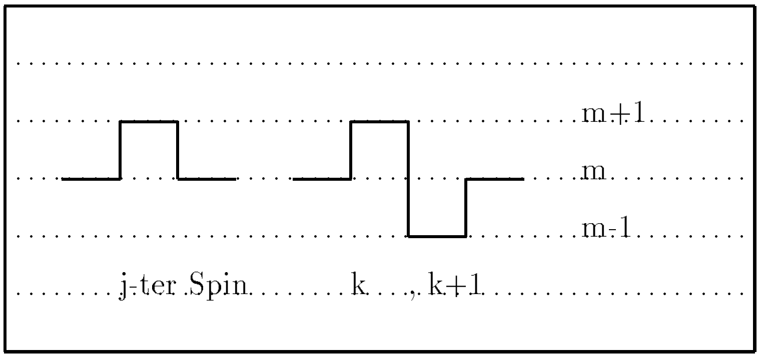


$$H_0 \mid p_6 > \; = \; \varepsilon_{p_6} \mid p_6 > \tag{3.50}$$
$$\varepsilon_{p_6} \; = \; 2 \tag{3.51}$$

$$\mid p_7 >:= \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \mp 1, \ldots s_k = m \pm 1, s_{k+1} = m \pm 1 \ldots m > \tag{3.52}$$

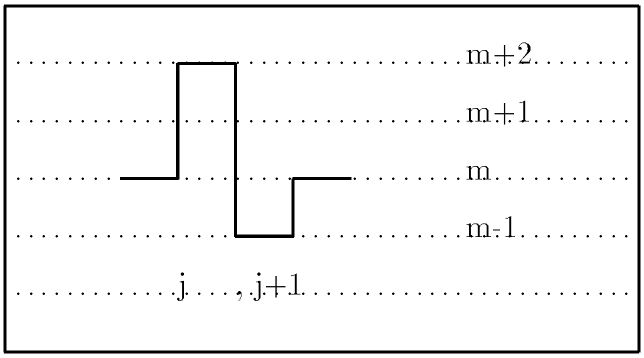
$$H_0 \mid p_7 > \; = \; \varepsilon_{p_7} \mid p_7 > \tag{3.53}$$
$$\varepsilon_{p_7} \; = \; 2 \tag{3.54}$$

$$\mid p_8 >:= \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \pm 1, s_{k+1} = m \mp 1 \ldots m > \tag{3.55}$$



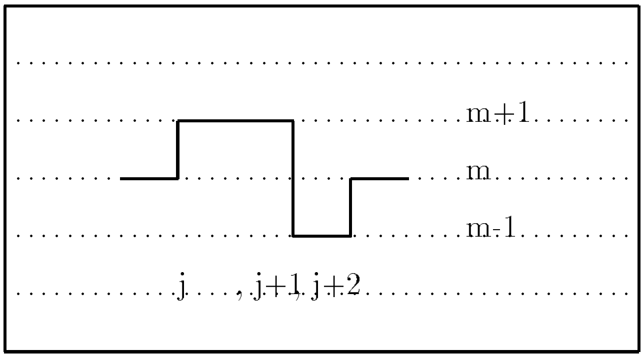
$$H_0 \mid p_8 > \; = \; \varepsilon_{p_8} \mid p_8 > \tag{3.56}$$
$$\varepsilon_{p_8} \; = \; 4 \tag{3.57}$$

$$\mid p_9 >:= \sum_{j} \lambda_{j} \mid m, \ldots s_j = m \pm 2, s_{j+1} = m \mp 1, \ldots m > \tag{3.58}$$



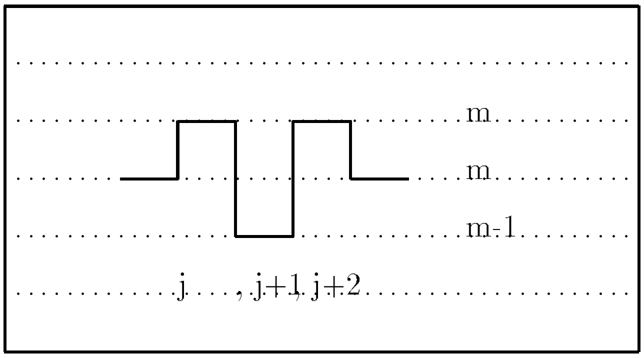
$$\begin{aligned} H_0 \mid p_9 > &= \varepsilon_{p_9} \mid p_9 > & (3.59)\\ \varepsilon_{p_9} &= 7 & (3.60) \end{aligned}$$

$$\mid p_{10} >:= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \pm 1 s_{j+2} = m \mp 1, \ldots m > \qquad (3.61)$$



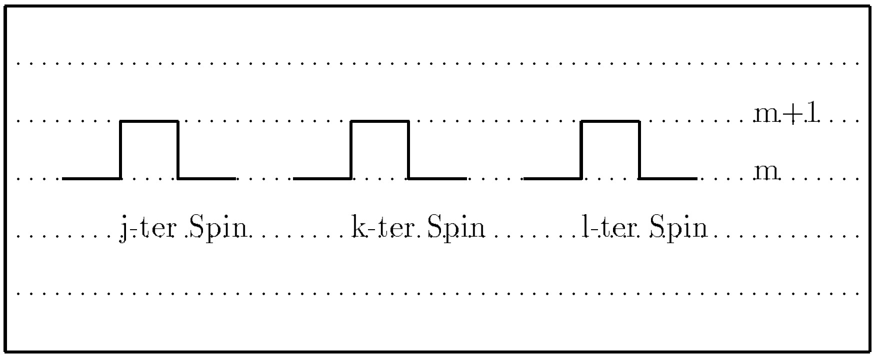
$$\begin{aligned} H_0 \mid p_{10} > &= \varepsilon_{p_{10}} \mid p_{10} > & (3.62)\\ \varepsilon_{p_{10}} &= 3 & (3.63) \end{aligned}$$

$$\mid p_{11} >:= \sum_j \lambda_j \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \mp 1 s_{j+2} = m \pm 1, \ldots m > \qquad (3.64)$$



$$\begin{aligned} H_0 \mid p_{11} > &= \varepsilon_{p_{11}} \mid p_{11} > & (3.65)\\ \varepsilon_{p_{11}} &= 5 & (3.66) \end{aligned}$$

$$\mid p_{12} >:= \sum_{j,k,l} \lambda_{j,k,l} \mid m, \ldots s_j = m \pm 1, \ldots s_k = m \pm 1, \ldots s_l = m \pm 1, \ldots m > \qquad (3.67)$$



$$H_0 \mid p_{12} > \; = \; \varepsilon_{p_{12}} \mid p_{12} > \tag{3.68}$$

$$\varepsilon_{p_{12}} \; = \; 3 \tag{3.69}$$

3.3 Abzählung der Zustände

Da die aus der Störungstheorie erhaltenen Formeln für die Energie-Eigenwerte eine Summation über alle möglichen Zwischenzustände verlangen, muß nicht nur die Energie, sondern auch die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten jeder Spin-Konfiguration bekannt sein. Ausgangs- und Endpunkt der Störungsentwicklung ist der Grundzustand. In sechster Ordnung erreicht man daher höchstens 3-Flip-Zustände, deren Energien bereits berechnet wurden. Im Folgenden befassen wir uns mit der Abzählung der Konfigurationen.

Für den 1-Flip-Zustand gibt es lediglich eine Realisierungs möglichkeit; auf eine Kette mit N Spins angewendet heißt das: jeder der N Spins kann vom Zustand m nach $m \pm 1$ angehoben werden. Daher wird dieser mit dem Faktor N gewichtet.

Zur Gewichtung der 2-Flip-Zustände genügt es, zunächst nur solche mit Flips in eine Richtung zu betrachten; die übrigen lassen sich diesen zuordnen. Sei nun der erste umgeklappte Spin an der Stelle j festgehalten. Dann ergeben sich für die zweite Anregung drei prinzipiell verschiedene Positionen:

1.) Der zweite Flip befindet sich ebenfalls an der Stelle j, d.h. es handelt sich um den Zustand $\mid j_1 >$. Diese Konfiguration läßt sich, genau wie diejenige mit einem Spin-Flip, N mal realisieren.

2.) Der zweite Flip sitzt auf einer der beiden zu j benachbarten Positionen (Zustand $\mid j_2 >$). Diese Möglichkeit wird mit dem Faktor 2N gewichtet.

3.) Der zweite Flip sitzt nicht auf einer der oben genannten Positionen (Zustand $\mid j_4 >$), d.h. es bleiben für diesen noch $N-3$ Plätze übrig. Damit ergibt sich der Gewichtungsfaktor $N(N-3)$.

Die Konfigurationen mit Flips in verschiedene Richtungen lassen sich nach dem selben Muster klassifizieren:

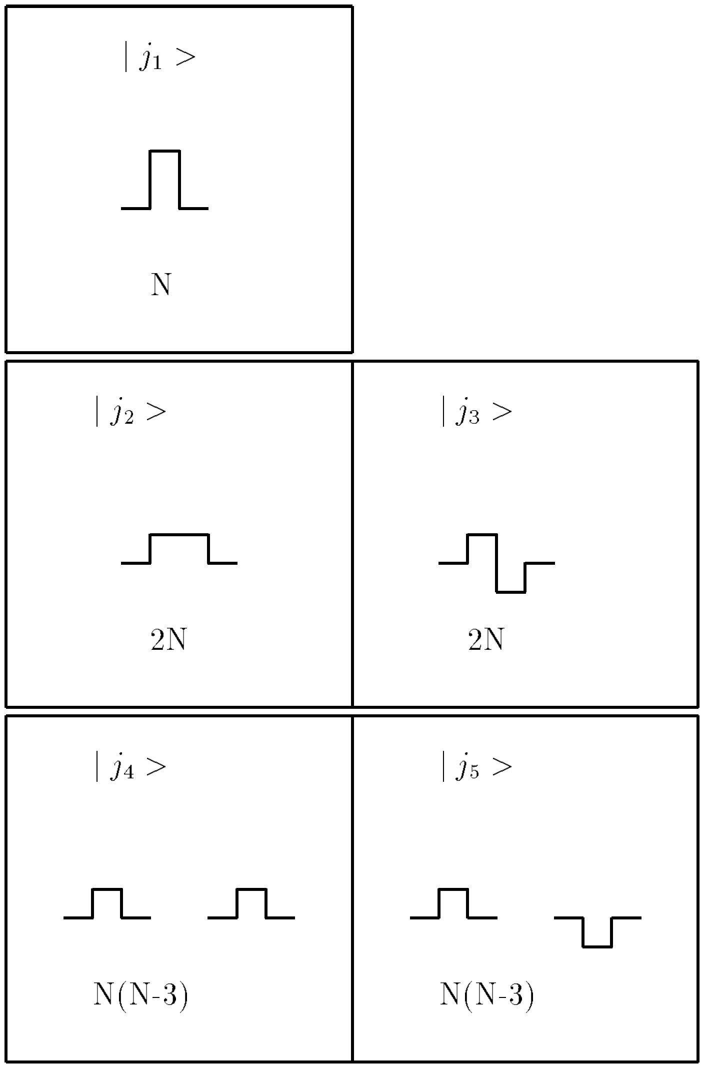
Der Zustand $\mid j_3 >$ enthält ebenso wie $\mid j_2 >$ Spin-Flips auf benachbarten Plätzen und erhält daher ebenfalls die Gewichtung 2N .

Der Zustand $\mid j_5 >$ entspricht der Konfiguration $\mid j_4 >$ und wird somit mit $N(N-3)$ gewichtet.

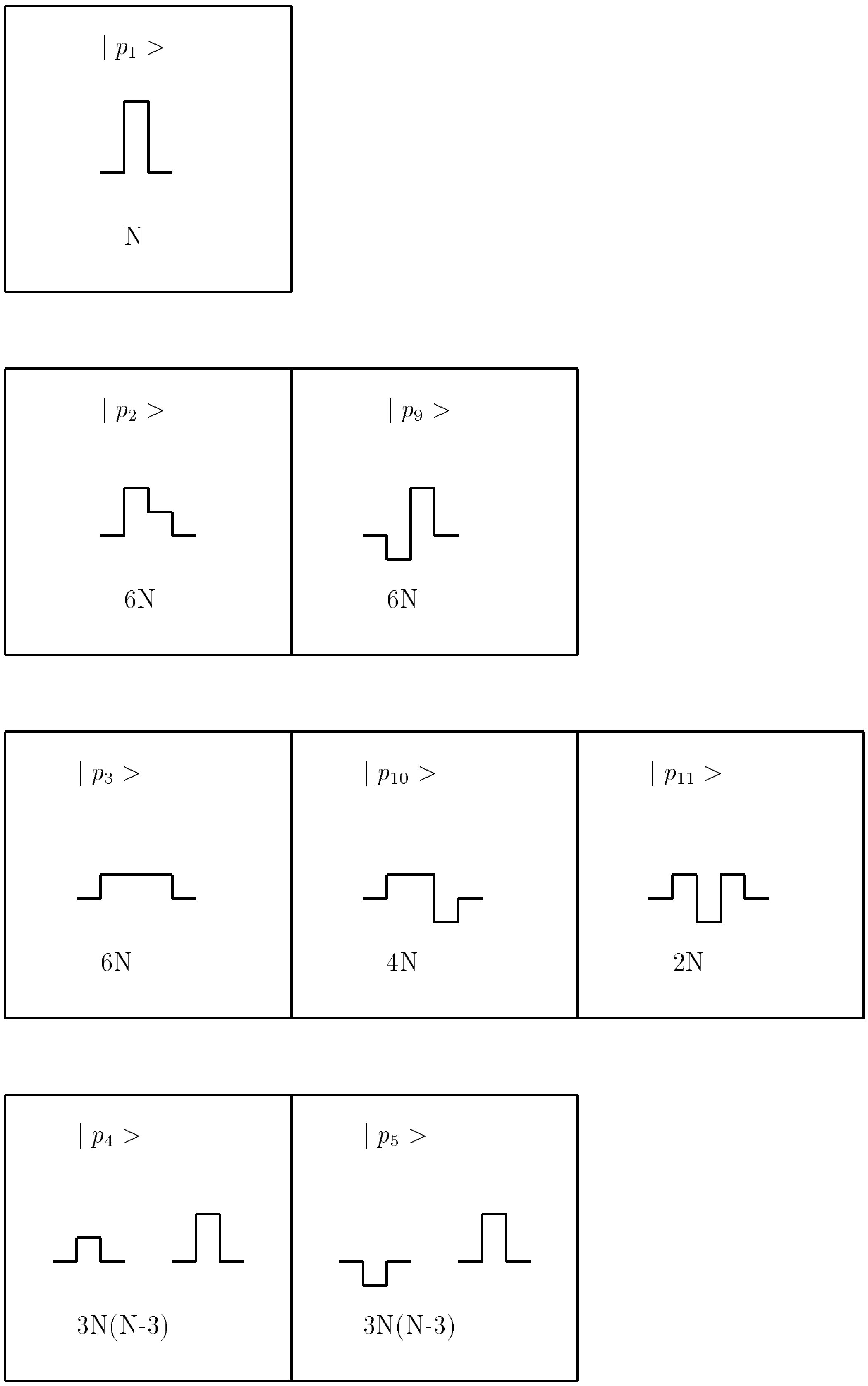
Insgesamt beträgt die Anzahl der Möglichkeiten für 2-Flip-Konfigurationen auf einer Kette mit N Spins N^2; dies erlaubt eine Überprüfung der Abzählung:

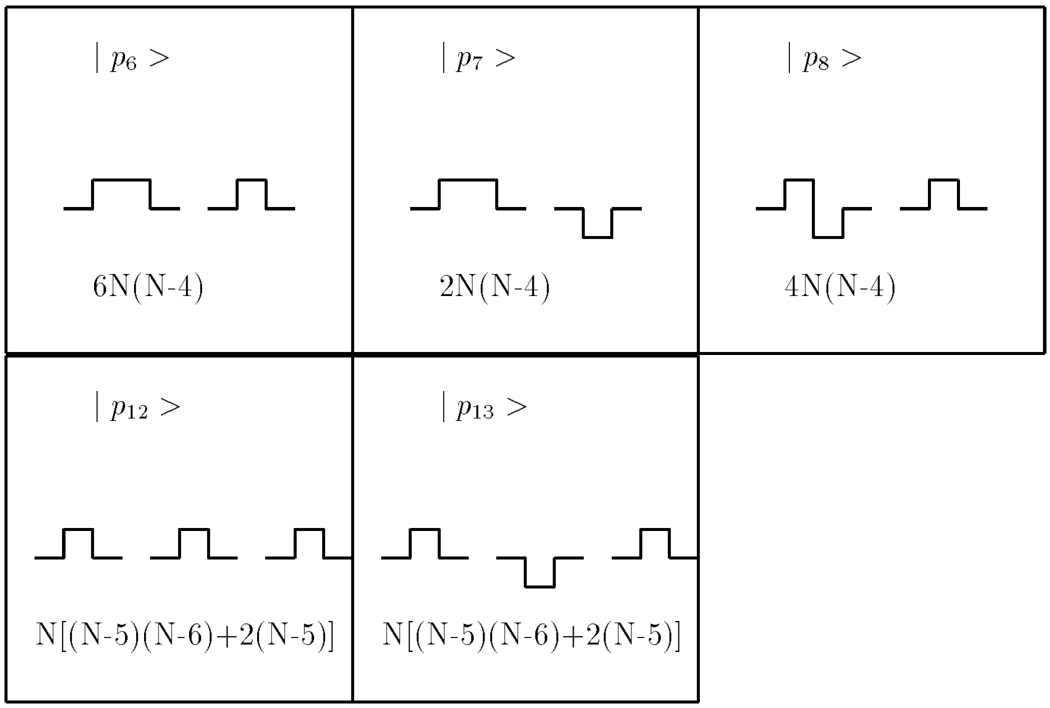
$$N + 2N + N(N-3) = N^2 \tag{3.70}$$

Die Ergebnisse werden, unter Verwendung der graphischen Darstellung der Spin-Konfigurationen, in folgender Tabelle zusammengefaßt:



Die Gewichtung der 3-Flip-Zustände erfolgt nun nach dem gleichen Prinzip, d.h. wir betrachten zunächst lediglich Zustände mit Flips in eine Richtung und ordnen die übrigen in das so erhaltene Schema ein. Wieviele Möglichkeiten gibt es also, bei festgehaltener Position des ersten Flips, eine gegebene Konfiguration zu erreichen? Bei dieser Abzählung ist zu beachten, daß Konfigurationen, die durch Vertauschung der Plätze des zweiten und dritten Flips ineinander überführt werden, getrennt gezählt werden müssen. Die Ergebnisse dieser Überlegungen fassen wir in Form der folgenden Tabelle zusammen:


| p_1 >
N
| p_2 >
6N
| p_9 >
6N
| p_3 >
6N
| p_{10} >
4N
| p_{11} >
2N
| p_4 >
3N(N-3)
| p_5 >
3N(N-3)



Dabei enthält die erste Spalte der Tabelle die Grundkonfigurationen mit Flips in eine Richtung, die daraus abgeleiteteten gemischten Zustände stehen in der jeweiligen Spalte daneben. Alle weiteren Konfigurationen erhält man durch Spiegelung der Graphen an der m-Linie; diese Operation entspricht in der mathematischen Definition der Spinzustände einer Umkehr aller Vorzeichen, so daß z.B. die j-te Spinvariable, die den Wert $m \pm 1$ habe, unter m-Spiegelung zu $m \mp 1$ wird. Da die Spiegelung die Energie und insbesondere die Gewichtungsfaktoren unverändert läßt, sind diese nun für alle in sechster Ordnung auftretenden Konfigurationen bekannt und können in die störungstheoretischen Formeln für die Energiebeiträge eingesetzt werden.

æ

3.4 Berechnung der Energiebeiträge bis zur 6. Ordnung

Zur Berechnung der Energie der Spin-Kette verwenden wir folgenden Ansatz:

$$E := \gamma E^{(1)} + \gamma^2 E^{(2)} + \gamma^3 E^{(3)} + \gamma^4 E^{(4)} + \gamma^5 E^{(5)} + \gamma^6 E^{(6)} \tag{3.71}$$

Wobei die $E^{(n)}$ die jeweiligen Beiträge in n-ter Ordnung zur Störungsentwicklung in γ sind, die im folgenden berechnet werden sollen. [6] [28]

In erster Ordnung erhält man:

$$E^{(1)} = < n \mid \tilde{V} \mid n > \tag{3.72}$$

$$= < n \mid V \mid n > + < n \mid V' \mid n > \tag{3.73}$$

Mit $\mid n >$ sei stets der Grundzustand bereichnet, in welchem alle Spinvariablen den Wert m annehmen. Wir können uns bei der gesamten Rechnung auf einen solchen Ausgangszustand mit beliebiger aber fester m-Quantenzahl beschränken, so daß wir nichtentartete Störungstheorie betreiben dürfen.
Das Potential V enthält eine Linearkombination der Auf- und Absteigeoperatoren $S_{\pm}$. Der Term $< n \mid V \mid n >$ enthält folglich das Skalarprodukt des Grundzustandes mit einem 1-Flip Zustand; dieses liefert aber aufgrund der Normierung keinen Beitrag. Daher bleibt von $E^{(1)}$:

$$\boxed{E^{(1)} = N \sum_{n} a_{2n} m^{2n} \qquad (3.74)}$$

Um die Koeffizienten a_{2n} zu berechnen setzen wir später die Potenzreihenentwicklung für diese in die Energiebeiträge ein.

In zweiter Ordnung erhält man:

$$E^{(2)} = \sum_{m}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \tag{3.75}$$

Wobei zu beachten ist, daß $\sum_m'$ Summation über alle möglichen Zwischenzustände verlangt, die nicht mit dem Grundzustand identisch sind. Welches sind nun aber die vom Grundzustand aus ereichbaren Konfigurationen? Um dies zu beantworten, setzen wir das Störpotential $\tilde{V}$ ein.

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= -\sum_{m}' \frac{(< n \mid V \mid m > + < n \mid V' \mid m >)(< m \mid V \mid n > + < m \mid V' \mid n >)}{\varepsilon_m} \qquad (3.76) \\ &= -\sum_{m}' \frac{< n \mid V \mid m >< m \mid V \mid n >}{\varepsilon_m} \end{aligned}$$

Um zu dieser Vereinfachung zu gelangen, wurde verwendet, daß ε_n gleich Null ist und daß diejenigen Terme, die V' enthalten aufgrund der Normierung keinen Beitrag leisten.
Setzt man nun für V die Spin-Flip-Operatoren $S_{\pm}$ ein, so ergibt sich:

$$E^{(2)} = -\frac{1}{4} \sum_{i,j} \sum_{m}' \frac{(< n \mid S_{i+} \mid m > + < n \mid S_{i-} \mid m >)(< m \mid S_{j+} \mid n > + < m \mid S_{j-} \mid n >)}{\varepsilon_m}$$

Mit

$$S_{\pm} \mid s, m >= \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} \mid s, m > \tag{3.77}$$

Jetzt erkennt man, daß die Zustände, die zu $E^{(2)}$ beitragen, 1-Flip-Zustände sind: S_{i+} angewendet auf den Grundzustand $\mid n>$ flipt den i-ten Spin nach oben, d.h. das Skalarprodukt mit $\mid m>$ ist gleich Null, außer wenn dieser der entsprechende 1Flip-Zustand ist. Die nachfolgende Anwendung von S_{i-} führt wieder auf den Grundzustand zurück. Diese Rückführung auf den Grundzustand gelingt nicht, falls die Auf- und Absteigeoperatoren auf unterschiedliche Spins wirken oder falls jeweils zwei Operatoren gleichen Typs hintereinander angewendet werden. Daher vereinfacht sich obige Gleichung zu:

$$E^{(2)} = -\frac{1}{4}\sum_i {\sum_m}' \frac{< n \mid S_{i+} \mid m >< m \mid S_{i-} \mid n > + < n \mid S_{i-} \mid m >< m \mid S_{i+} \mid n >}{\varepsilon_m} \tag{3.78}$$

Wendet man nun $S_\pm$ auf die 1-Flip-Zustände an, so gilt:

$$S_\pm \mid s, m \pm 1 >= \sqrt{s(s+1) - (m \pm 1)m} \mid s, m > \tag{3.79}$$

Dies legt die Definition folgender Normierungsfaktoren nah:

$$C_\pm := s(s+1) - m(m \pm 1) \tag{3.80}$$

Damit bleibt von dem in Gleichung (3.78) rechts stehenden Term (der einen Zustand mit einem Flip nach oben repräsentiert) nur der Faktor C_+ ; entsprechendes gilt für den linken Term, dieser liefert den Faktor C_-. Summation über alle Spins der Kette ergibt einen Faktor N. Damit lautet der Beitrag in zweiter Ordnng:

$$\boxed{E^{(2)} = -\frac{1}{4}N\Big(C_+ + C_-\Big) \qquad (3.81)}$$

Nun zur dritten Ordnung:

$$\begin{aligned} E^{(3)} \quad = \quad & {\sum_{j,m}}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)} \\ & - < n \mid \tilde{V} \mid n > {\sum_m}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \end{aligned} \tag{3.82}$$

Die obigen Terme werden im folgenden getrennt berechnet; zur Abkürzung verwenden wir dabei:

$$\begin{aligned} A: &= \sum_{j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)} && (3.83) \\ B: &= - < n \mid \tilde{V} \mid n > \sum_{m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} && (3.84) \end{aligned}$$

Analog zu den bei der Berechnung von $E^{(1)}$ und $E^{(2)}$ angeführten Argumenten, erlauben die Bedingungen, daß der Anfangs- und der Endzustand der Grundzustand sein müssen und daß die Zwischenzustände, über die summiert wird, nicht mit diesem identisch sein dürfen, eine Vereinfachung der Terme. Von A bleibt :

$$\begin{aligned} A &= \sum_{j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_j \varepsilon_m} < n \mid V \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid n > && (3.85) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_j \varepsilon_m} (< n \mid S_{i+} \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid S_{i-} \mid n > && (3.86) \\ &\quad + < n \mid S_{i-} \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid S_{i+} \mid n >) \end{aligned}$$

Es handelt sich hier wieder um 1-Flip-Zustände; das Potential V' ändert die m-Quantenzahl nicht, es wird als Funktion dieser aufgefaßt, d.h.

$$V'(m) := \sum_{n=1}^{[S]} a_{2n} m^{2n} \tag{3.87}$$

Unter Verwendung der in Definition (3.80)erhält man:

$$A = \frac{1}{4} N \Big\{ C_+ [V'(m+1) + (N-1)V'(m)] + C_- [V'(m-1) + (N-1)V'(m)] \Big\} \tag{3.88}$$

Nun zu Teil B: der erste Faktor dieses Terms ist bereits in $E^{(1)}$ aufgetreten, der zweite ist analog zu $E^{(2)}$. Folglich erhält man:

$$\begin{aligned} B &= - < n \mid V' \mid n > \sum_{m}{}' \frac{1}{\varepsilon_m^2} < n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n > && (3.89) \\ &= - < n \mid V' \mid n > \frac{1}{4} N (C_+ + C_-) && (3.90) \\ &= - \frac{1}{4} N^2 V'(m) \Big(C_+ + C_- \Big) && (3.91) \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich damit:

$$E^{(3)} = \frac{1}{4} N \Big\{ C_+[V'(m+1) - V'(m)] + C_-[V'(m-1) - V'(m)] \Big\} \tag{3.92}$$

Wie erwartet heben sich die Terme, die N^2 enthalten gegenseitig auf, so daß die Energie der Spin-Kette proportional zu N ist. Der Übersichtlichkeit halber führen wir noch eine Abkürzung ein:

$$W_\pm := V'(m \pm 1) - V'(m) \tag{3.93}$$

Wobei $E^{(3)}$ sowohl zur dritten als auch zur sechsten Ordnung beitragen kann, je nachdem welche Terme der Entwicklung vonV' verwendet werden. Zusammengefaßt erhält man das Resultat:

$$\boxed{E^{(3)} = \frac{1}{4} N \Big(C_+ W_+ + C_- W_- \Big) \qquad (3.94)}$$

In vierter Ordnung erhält man:

$$\begin{aligned} E^{(4)} \quad = \quad & \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)} \\ & - \sum_{j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >< n \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \\ & - \sum_{m}{}' \frac{|< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^3} \end{aligned} \tag{3.95}$$

Um die Summanden getrennt zu berechnen, verwenden wir die folgenden Abkürzungen:

$$A : \quad = \quad - \sum_{m}{}' \frac{|< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >|^2}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^3} \tag{3.96}$$

$$B : \quad = \quad - \sum_{j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >< n \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \tag{3.97}$$

$$C : \quad = \quad \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)} \tag{3.98}$$

Der Teil A berechnet sich analog zu $E^{(2)}$:

$$A = \sum_m{}' \Big(\sum_{i.j} < n \mid V_i \mid m >< m \mid V_j \mid n > \Big)^2 \tag{3.99}$$

$$= \frac{1}{16} N^2 \Big(C_+ + C_- \Big)^2 \tag{3.100}$$

Für Teil B gilt in Analogie zu $E^{(3)}$:

$$B = < n \mid \tilde{V} \mid n > \sum_{j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_j \varepsilon_m} < n \mid V \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid n > \tag{3.101}$$

$$= \frac{1}{4} N V'(m) \Big(W_+ C_+ + W_- C_- \Big) \tag{3.102}$$

Da in der Störungsentwicklung $\gamma^4 E^{(4)}$ gebildet wird, und da sowohl V' alsauch $W_\pm$ in niedrigster Ordnung proportional zu γ sind, spielt der Term B erst in sechster Ordnung eine Rolle. Ab dieser Ordnung führen wir nur noch Terme auf, die proportional zur Kettenlänge N sind, denn alle höhere Potenzen von N enthaltenden Anteile heben sich in der Endabrechnung gegenseitig auf.
Es bleibt nun noch Teil C auszuwerten:

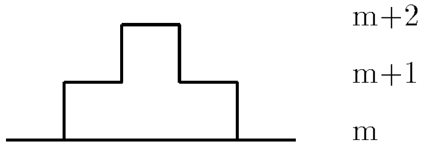
$$C = - \sum_{k,j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m} \Big(< n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid n > \tag{3.103}$$
$$+ < n \mid V \mid k >< k \mid V' \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid n > \Big)$$

Zur Abkürzung sei:

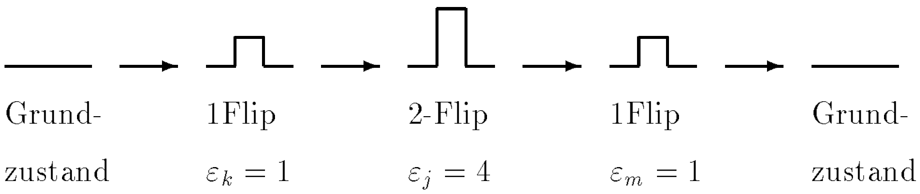
$$C_1 := \sum_{k,j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m} < n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid n > \tag{3.104}$$

$$C_2 := \sum_{k,j,m}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m} < n \mid V \mid k >< k \mid V' \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid n > \tag{3.105}$$

Zunächst wenden wir uns dem Term C_1 zu; dieser enthält vier die m-Quantenzahl ändernde Potentiale V. Aus diesem Grund muß der Zwischenzustand $\mid j >$ eine 2-Flip-Konfiguration sein. Unter diesen müssen wir nun verschiedene Anordnungsmöglichkeiten mit jeweils eigenen Energien und Gewichtungsfaktoren berücksichtigen. Dazu ist es hilfreich, eine graphische Darstellung einzuführen, welche die Angriffspunkte des Potentials V klassifiziert. [29]



Dies ist ein 1-Loop-Term, d.h. die Wechselwirkung greift nur an einem Spin der Kette an. Welche Spin-Konfigurationen sind nun auf diese Weise erreichbar? Zur Beantwortung dieser Frage bedienen wir uns der die Konfiguration der Kette repräsentierenden Graphen. Mit diesen lassen sich Flußdiagramme konstruieren, die den Ablauf der Wechselwirkung veranschaulichen:



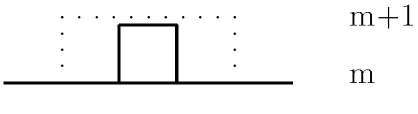
Aus diesem Diagramm kann man den ersten Beitrag zu C_1 ablesen; dabei werden die durch Spiegelung an der m-Linie erzeugten Graphen, die den gleichen Energiebeitrag liefern, direkt mitberücksichtigt, indem die Normierungsfaktoren mit invertierten Vorzeichenindizes addiert werden.

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{4}\Big(C_+D_+ + C_-D_-\Big) \tag{3.106}$$

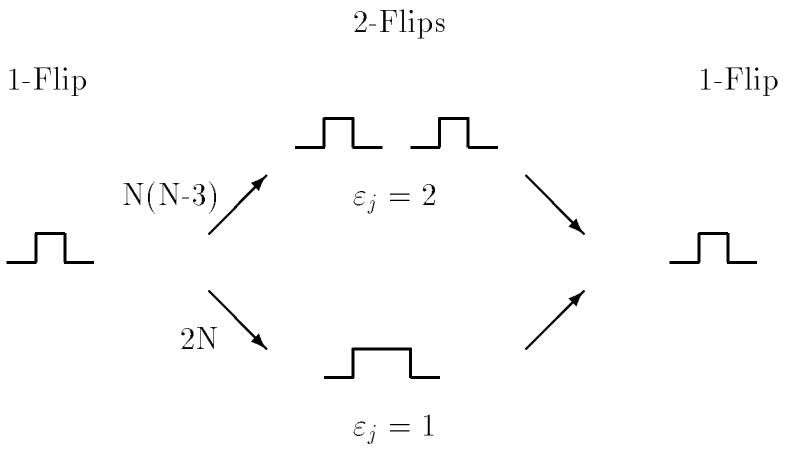
Mit

$$D_\pm := s(s+1) - (m \pm 1)(m \pm 2) \tag{3.107}$$

Die so definierten Größen sind Normierungsfaktoren der zweiten Stufe, sie treten auf bei Flips vom $(m \pm 1)$ nach $(m \pm 2)$. Der Faktor $\frac{1}{4}$, der im Ausdruck für E_1 auftaucht, bleibt nach Auswertung des Energienenners übrig: die Faktoren ε_k und ε_m sind gleich eins, die Energie ε_j des 2-Flip-Zustandes beträgt vier.
Damit sind die 1-Loop-Terme erledigt, denn der oben bebandelte Graph repräsentiert die einzige Realisierungsmöglichkeit eines solchen.
Für 2-Loop-Wechselwirkungen bestehen hingegen verschiedene Möglichkeiten; diese werden im Folgenden aufgeführt:



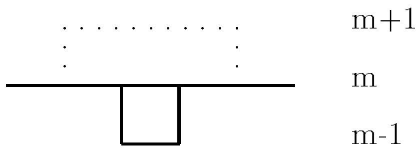
Zu diesem Graphen gehört das folgende Flußdiagramm:



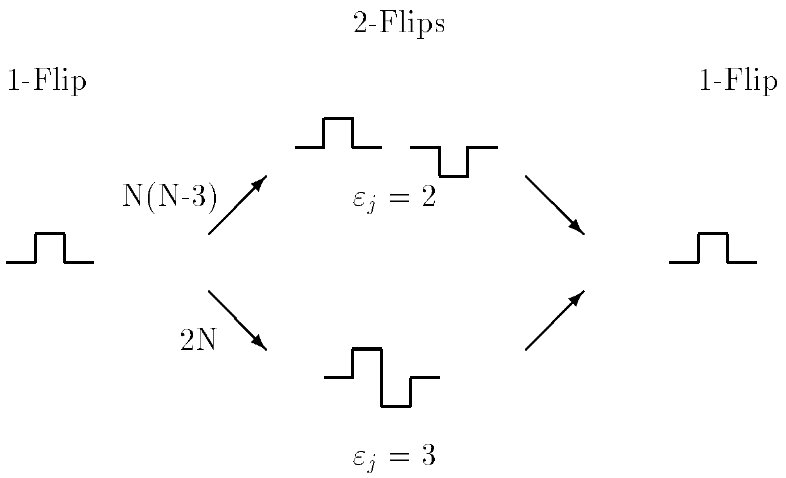
Die auftretenden Verzweigungen entsprechen einer Fallunterscheidung nach der relativen Lage der Spin-Flips. Der Energiebeitrag kann wieder direkt aus dem Diagramm abgelesen werden; aus den früher berechneten Abzählungen der Zustände ergeben sich jetzt in der graphischen Darstellung Gewichtungen für die verschiedenen Zweige.

$$\frac{E_2}{N} = \Big(C_+^2 + C_-^2\Big)\Big((N-3)\frac{1}{2} + 2\Big) \tag{3.108}$$

$$= \frac{1}{2}\Big(C_+^2 + C_-^2\Big)\Big(1 + N\Big) \tag{3.109}$$



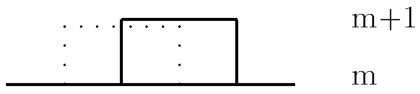
Zu diesem gehört das folgende Diagramm:



Daraus ergibt sich der Energiebeitrag:

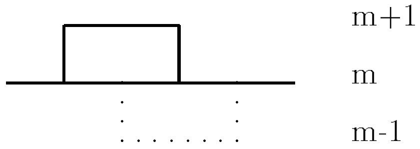
$$\frac{E_3}{N} = \Big(C_+C_- + C_-C_+\Big)\Big((N-3)\frac{1}{2} + \frac{2}{3}\Big) \tag{3.110}$$

$$= C_+C_-\Big(N - \frac{5}{3}\Big) \tag{3.111}$$



Hier erhält man das gleiche Flußdiagramm, und folglich auch den gleichen Energieterm, wie im Falle von E_2 :

$$\frac{E_4}{N} = \frac{1}{2}\Big(C_+^2 + C_-^2\Big)\Big(1 + N\Big) \tag{3.112}$$



Dieser Beitrag entspricht dem für E_3 erhaltenen:

$$\frac{E_5}{N} = C_+C_-\Big(N - \frac{5}{3}\Big) \tag{3.113}$$

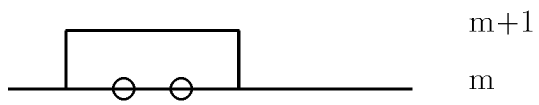
Insgesamt gilt:

$$C_1 = -\frac{1}{16}\sum_{i=1}^{5} E_i \tag{3.114}$$

Der Faktor $\frac{1}{16}$ entsteht durch vierfaches Anwenden des Potentials V, das jeweils einen Faktor$\frac{1}{2}$ liefert.

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{1}{16}N\Big\{\frac{1}{4}\Big(C_+D_+ + C_-D_-\Big) \\ &\quad + \Big(C_+^2 + C_-^2\Big)\Big(1+N\Big) + 2C_+C_-\Big(N - \frac{5}{3}\Big)\Big\} \end{aligned} \tag{3.115}$$

Der Term C_2 läßt sich auf folgende Weise graphisch veranschaulichen:



Die Kreise symbolisieren dabei die Wirkung des Potentials V', das die m-Quantenzahl invariant läßt. Daher erreicht man mit dem Beitrag C_2 nur 1-Flip Zustände; diese liefern die folgende Energie:

$$
\begin{aligned}
C_2 &= -\frac{1}{4}N\Big\{C_+\Big(V'(m+1)-V'(m)\Big)^2+C_-\Big(V'(m-1)-V'(m)\Big)^2\Big\} &(3.116)\\
&= -\frac{1}{4}N\Big(C_+W_+^2+C_-W_-^2\Big) &(3.117)
\end{aligned}
$$

Der Term C_2 ist von sechster Ordnung in γ; es wurden wieder nur Summanden berücksichtigt, die proportional zu N sind.

Der gesamte Beitrag zu $E^{(4)}$ ergibt sich schließlich durch Summation der Anteile A, B und C :

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\frac{E^{(4)}}{N} &= -\frac{1}{16}\Big\{\frac{1}{4}\Big(C_+D_+ + C_-D_-\Big)+C_+^2+C_-^2-\frac{10}{3}C_+C_-\Big\} \qquad (3.118)\\
&\quad -\frac{1}{4}\Big\{C_+W_+^2+C_-W_-^2\Big\}+\frac{1}{4}V'(m)\Big\{W_+C_+ + W_-C_-\Big\}
\end{aligned}
}
$$

In fünfter Ordnung erhält man, unter ausschließlicher Berücksichtigung der Summanden, die proportional zu N sind, den folgenden Beitrag:

$$
E^{(5)} = \sum_{k,j,m,l}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid l >< l \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n-\varepsilon_k)(\varepsilon_n-\varepsilon_j)(\varepsilon_n-\varepsilon_m)(\varepsilon_n-\varepsilon_l)} \qquad (3.119)
$$

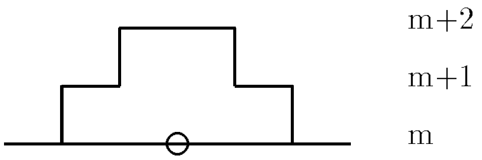
Von diesen Termen bleibt:

$$
\begin{aligned}
E^{(5)} &= \sum_{k,j,m,l}{}' \frac{1}{\varepsilon_k\varepsilon_j\varepsilon_m\varepsilon_l}\Big(< n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid n > \\
&\quad + < n \mid V \mid k >< k \mid V' \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid n > \\
&\quad + < n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V' \mid l >< l \mid V \mid n > \Big) &(3.120)
\end{aligned}
$$

Sei zur Abkürzung:

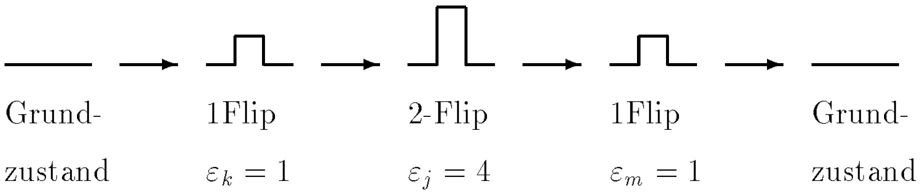
$$
\begin{aligned}
A &:= \sum_{k,j,m,l}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m \varepsilon_l} < n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid n > \\
B_1 &:= \sum_{k,j,m,l}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m \varepsilon_l} < n \mid V \mid k >< k \mid V' \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid n > \\
B_2 &:= \sum_{k,j,m,l}{}' \frac{1}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m \varepsilon_l} < n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V' \mid l >< l \mid V \mid n >
\end{aligned}
$$

Zunächst behandeln wir den Term A, der symmetrische Graphen beinhaltet.



Die zugehörige Spin-Konfiguration entspricht derjenigen, die im ersten Graphen von $E^{(4)}$ auftritt:

Baum 1



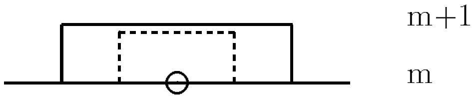
Das Potential V' liefert zusätzliche Normierungsfaktoren. Damit erhält man:

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{4}\Big(C_+ D_+ W_{++} + C_- D_- W_{--}\Big) \tag{3.121}$$

Wobei zur Abkürzung verwendet wurde:

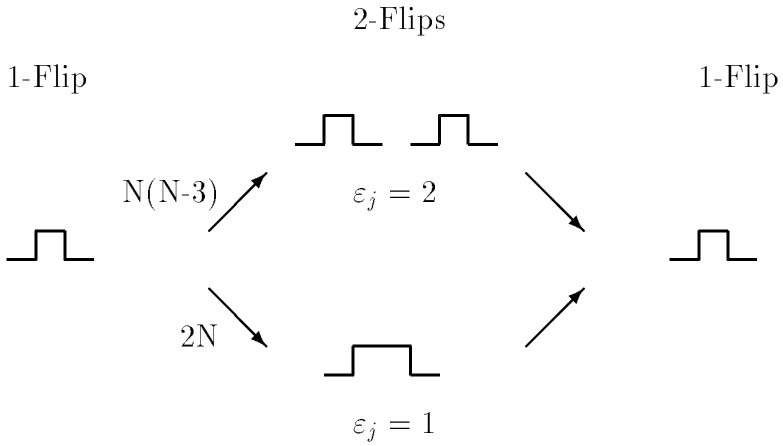
$$W_{++} := V'(m+2) - V'(m) \tag{3.122}$$
$$W_{--} := V'(m-2) - V'(m) \tag{3.123}$$

Die weiteren Beiträge zu $E^{(5)}$ werden durch 2-Loop-Graphen repräsentiert.



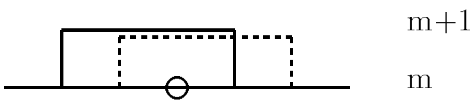
Die Spin-Konfiguration ergibt sich wie folgt:

Baum 2



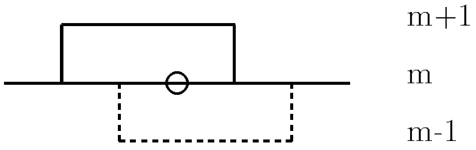
$$\frac{E_2}{N} = C_+^2 W_+ + C_-^2 W_- \tag{3.124}$$

Den selben Beitrag liefert der folgende Graph:

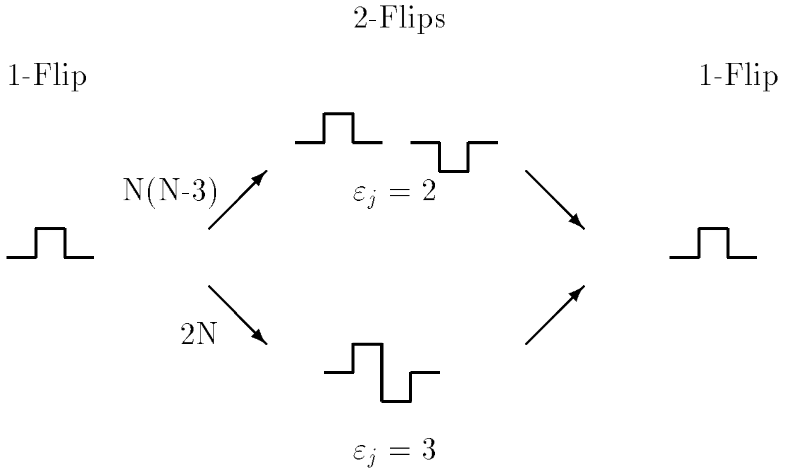


$$\frac{E_3}{N} = C_+^2 W_+ + C_-^2 W_- \tag{3.125}$$

Eine weitere Konfiguration wird vom folgenden Graphen geliefert:



Baum 3

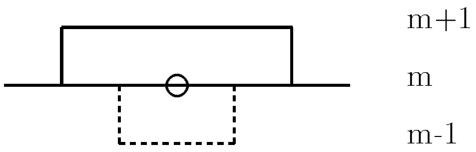


$$\frac{E_4}{N} = -\frac{5}{3} C_+ C_- W_{+-} \tag{3.126}$$

Wobei die Abkürzung W_{+-} eingeführt wurde mit:

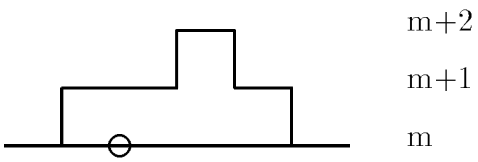
$$W_{+-} := V'(m+1) + V'(m-1) - 2V'(m) \tag{3.127}$$

Der nächste Graph liefert den gleichen Energiebeitrag:



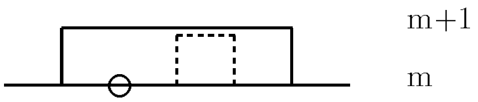
$$\frac{E_5}{N} = -\frac{5}{3} C_+ C_- W_{+-} \tag{3.128}$$

Damit sind die zu Teil A gehörenden Terme vollständig aufgelistet, und wir wenden uns jetzt den Summanden B_1 und B_2 zu. Der Term B_1 enthält die folgenden Graphen:



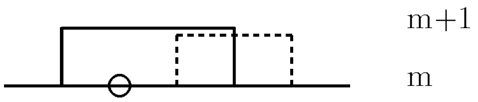
Dies entspricht der Konfiguration von Baum 1.

$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{4}\Big(C_+ D_+ W_+ + C_- D_- W_-\Big) \tag{3.129}$$



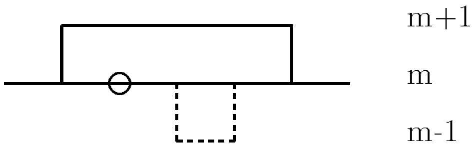
Die Konfiguration wird durch Baum 2 dargestellt.

$$\frac{E_2}{N} = \frac{1}{2}\Big(C_+^2 W_+ + C_-^2 W_-\Big) \tag{3.130}$$



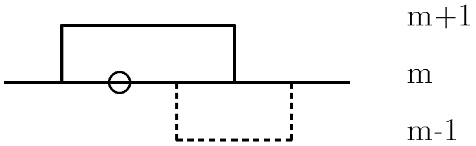
Die Konfiguration ist die gleiche wie oben.

$$\frac{E_3}{N} = \frac{1}{2}\Big(C_+^2 W_+ + C_-^2 W_-\Big) \tag{3.131}$$



Dies entspricht der Konfiguration von Baum 3.

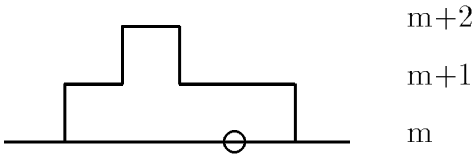
$$\frac{E_4}{N} = -\frac{5}{6}C_+C_-\Big(W_+ + W_-\Big) \tag{3.132}$$

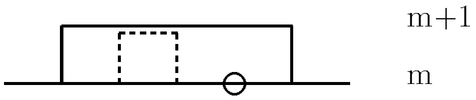


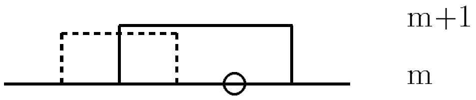
Dieser Graph liefert die gleiche Energie wie oben.

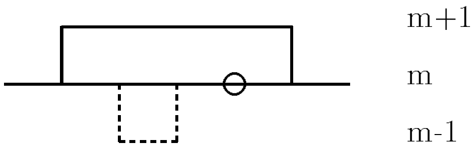
$$\frac{E_5}{N} = -\frac{5}{6}C_+C_-\Big(W_+ + W_-\Big) \tag{3.133}$$

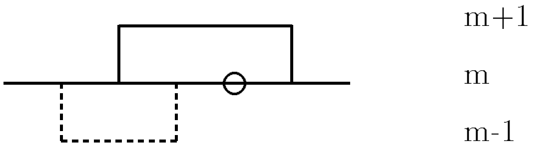
Der Teil B_2 enthält nun Graphen, die sich aus den im Term B_1 enthaltenen ergeben, indem man sie an einer vertikalen (senkrecht zur m-Linie) außerhalb des Graphen liegenden Achse spiegelt. Die durch eine solche vertikale Spiegelung erzeugten Graphen seien im Folgenden aufgelistet:











Die zu diesen Graphen gehörenden Konfigurationen, können alle aus den obigen Baumdiagrammen konstruiert werden, indem diese rückwärts gelesen werden, d.h. man beginnt mit dem Endzustand und kommt beim Anfangszustand an. Durch diese Richtungsumkehr ändern sich die entsprechenden Energiebeiträge nicht. Daher läßt sich der Term B_2 berücksichtigen, indem alle aus B_1 erhaltenen Energien doppelt gezählt werden.

Schließlich gewinnen wir durch Summation der Energiebeiträge das folgende Resultat für die fünfte Ordnung:

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{E^{(5)}}{N} &= \frac{1}{16}\Big\{\frac{1}{4}\Big(C_+D_+W_{++} + C_-D_-W_{--}\Big) \\ &+4\Big(C_+^2W_+ + C_-^2W_-\Big) + \frac{1}{2}\Big(C_+D_+W_+ + C_-D_-W_-\Big) \\ &-\frac{10}{3}C_+C_-\Big(W_{+-} + W_+ + W_-\Big)\Big\}\end{aligned} \qquad (3.134)}$$

In sechster Ordnung erhält man:

$$E^{(6)} = \sum_{kjmlp}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid l >< l \mid \tilde{V} \mid p >< p \mid \tilde{V} \mid n >}{(\varepsilon_n - \varepsilon_k)(\varepsilon_n - \varepsilon_j)(\varepsilon_n - \varepsilon_m)(\varepsilon_n - \varepsilon_l)(\varepsilon_n - \varepsilon_p)}$$

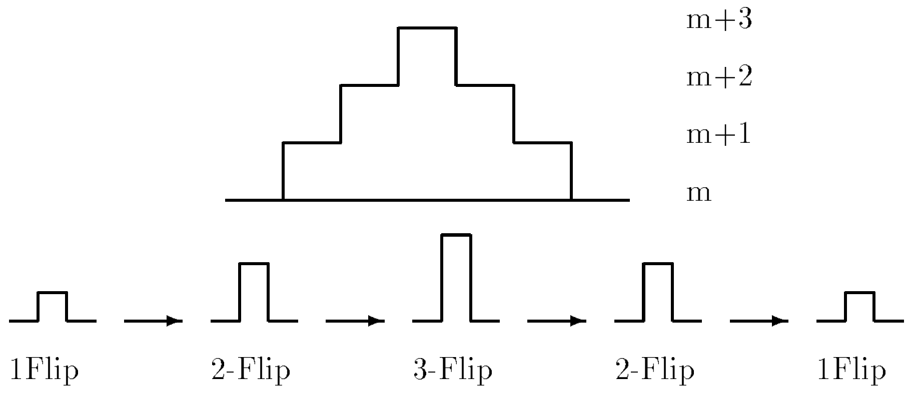
Wobei nur dieser erste Term der Energiekorrektur einen Beitrag liefert, der von sechster Ordnung im Störungsparameter γ und proportional zur Kettenlänge N ist. Aufgrund dieser Bedingungen läßt sich der obige Ausdruck noch weiter vereinfachen :

$$E^{(6)} = \sum_{kjmlp}{}' \frac{< n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid p >< p \mid V \mid n >}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m \varepsilon_l \varepsilon_p}$$

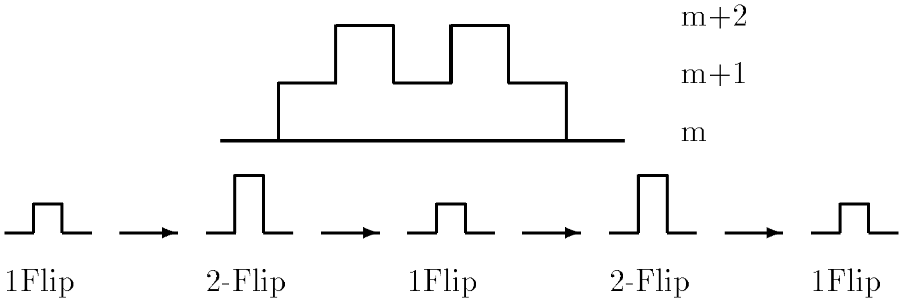
Hier treten zum ersten mal 3-Flip-Zustände auf; diese klassifizieren wir wie vorher nach den Angriffspunkten des Wechselwirkungspotentials. Greift dieses nur an einer Stelle der Spin-Kette an, so erhält man 1-Loop Graphen; d.h. die Zahl der Loops entspricht der Zahl der vom Störpotential betroffenen Spins. Im Folgenden werden die Graphen mit den zugehörigen Flußdiagrammen und den jeweiligen Energiebeiträgen aufgelistet.

Zunächst wenden wir uns den 1-Loop Graphen zu. Hier benötigen wir zusätzliche Normierungsfaktoren der dritten Stufe, die durch die folgende Definition gegeben seien:

$$E_{\pm} := s(s+1) - (m \pm 2)(m \pm 3) \tag{3.135}$$

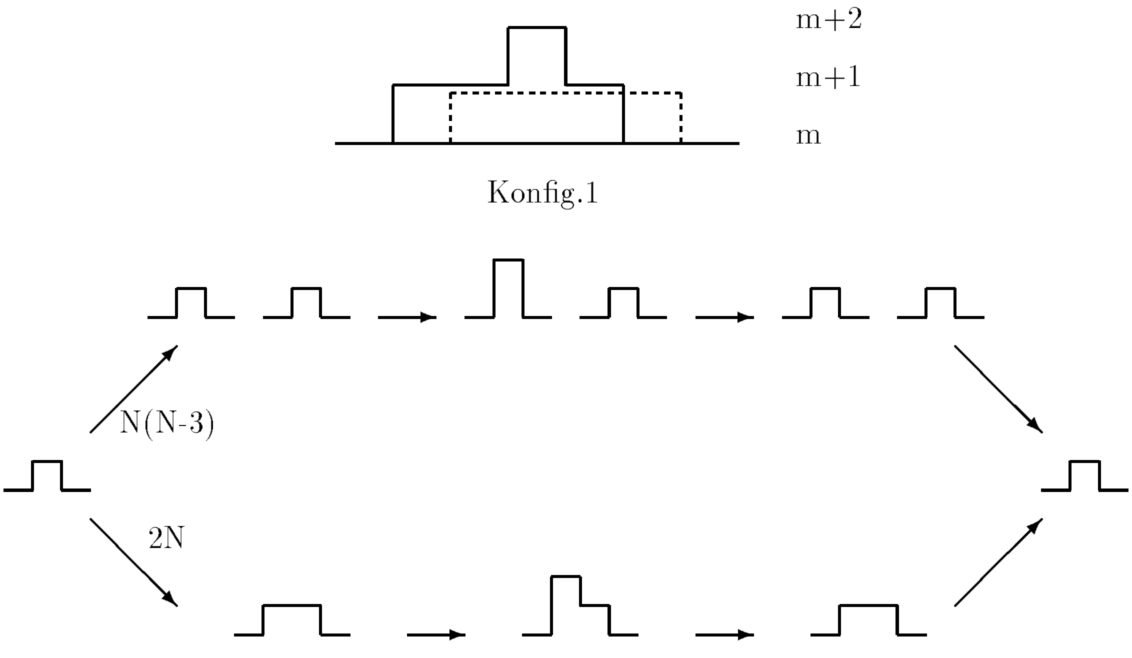


$$\frac{E_1}{N} = \frac{1}{144}\Big(C_+ D_+ E_+ + C_- D_- E_-\Big) \tag{3.136}$$

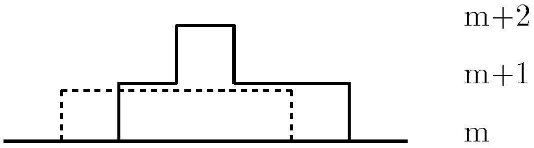


$$\frac{E_2}{N} = \frac{1}{16}\Big(C_+ D_+^2 + C_- D_-^2\Big) \tag{3.137}$$

2-Loop Graphen:

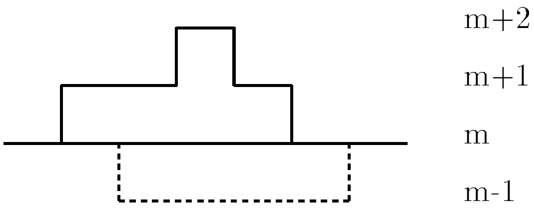


$$\frac{E_1}{N} = \frac{31}{60}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.138}$$

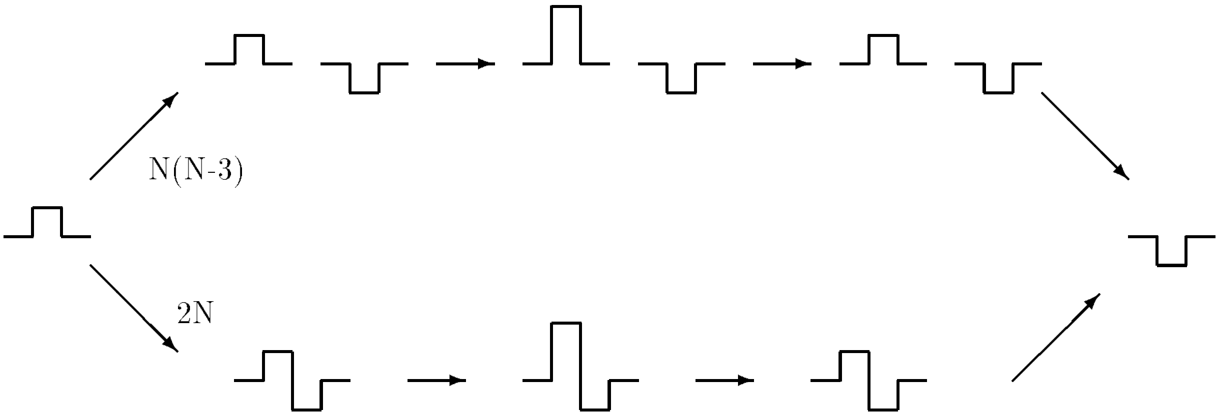


(wie Konfig.1)

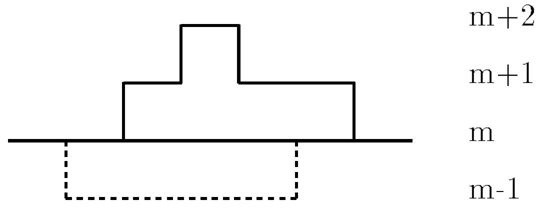
$$\frac{E_2}{N} = \frac{31}{60}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.139}$$



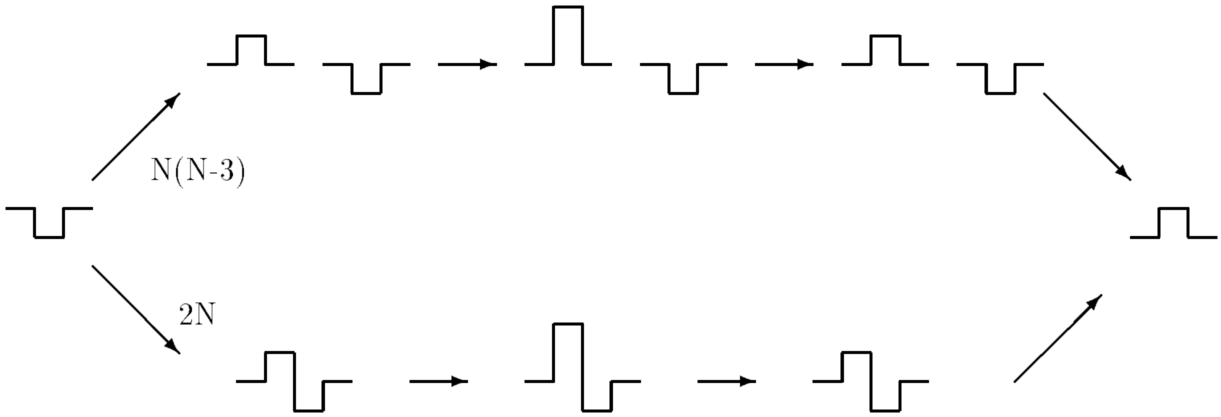
Konfig.2



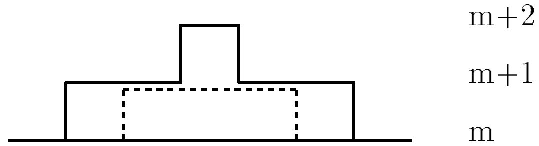
$$\frac{E_3}{N} = -\frac{149}{1260} C_+ C_- \Big(D_+ + D_-\Big) \tag{3.140}$$



Konfig.3

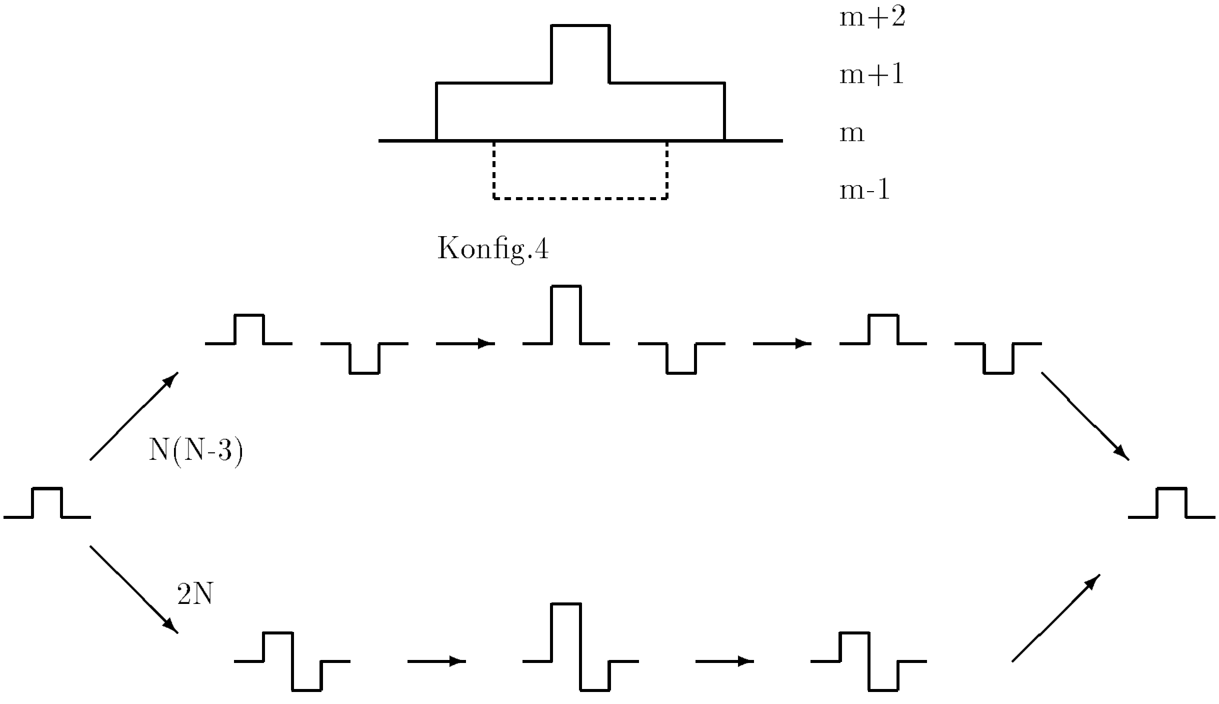


$$\frac{E_4}{N} = -\frac{149}{1260} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.141}$$

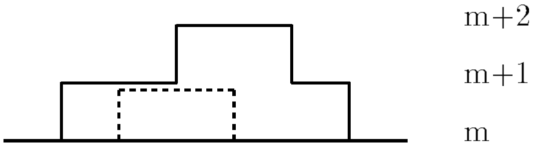


(wie Konfig. 1)

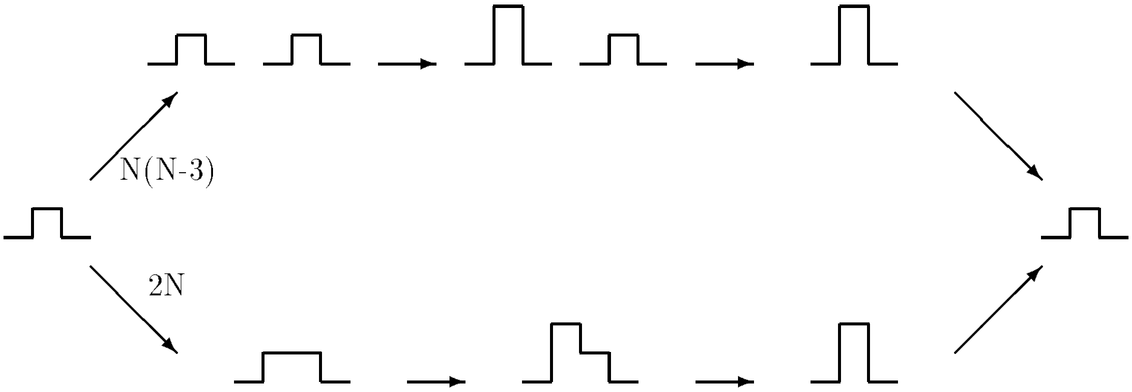
$$\frac{E_5}{N} = \frac{31}{60} \Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_- \Big) \tag{3.142}$$



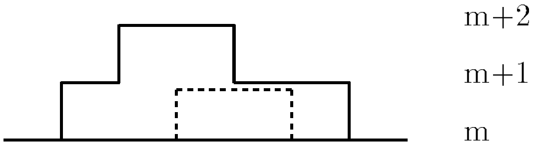
$$\frac{E_6}{N} = -\frac{149}{1260} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.143}$$



Konfig.5

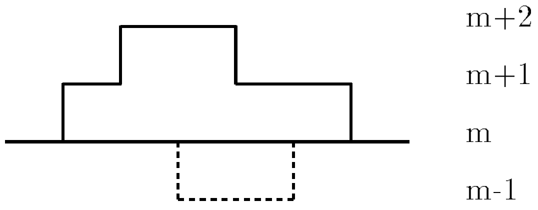


$$\frac{E_7}{N} = \frac{11}{120}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.144}$$

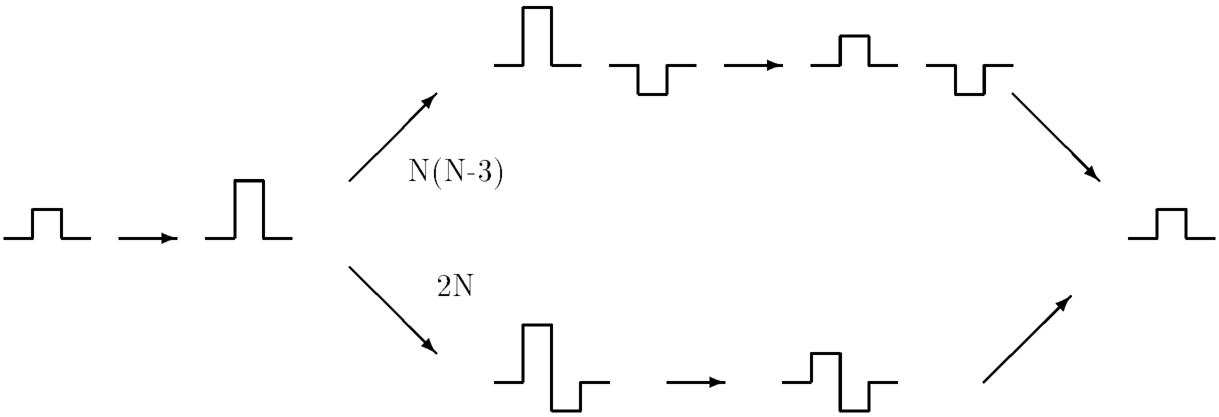


(wie Konfig. 5)

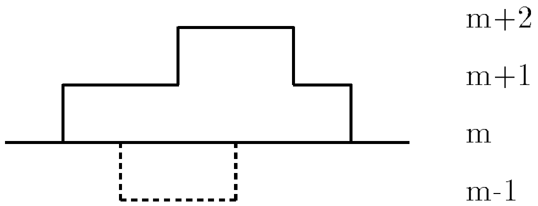
$$\frac{E_8}{N} = \frac{11}{120}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.145}$$



Konfig.6

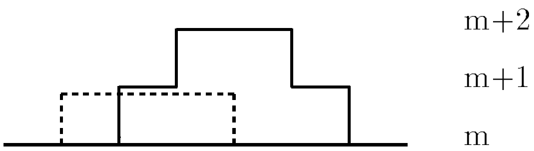


$$\frac{E_9}{N} = -\frac{43}{840} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.146}$$



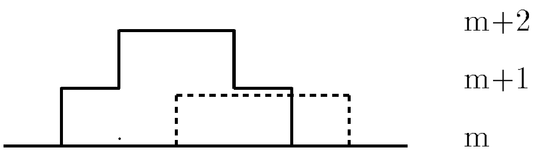
(wie Konfig. 6)

$$\frac{E_{10}}{N} = -\frac{43}{840} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.147}$$



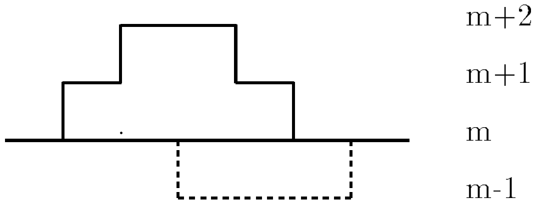
(wie Konfig. 5)

$$\frac{E_{11}}{N} = \frac{11}{120}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.148}$$

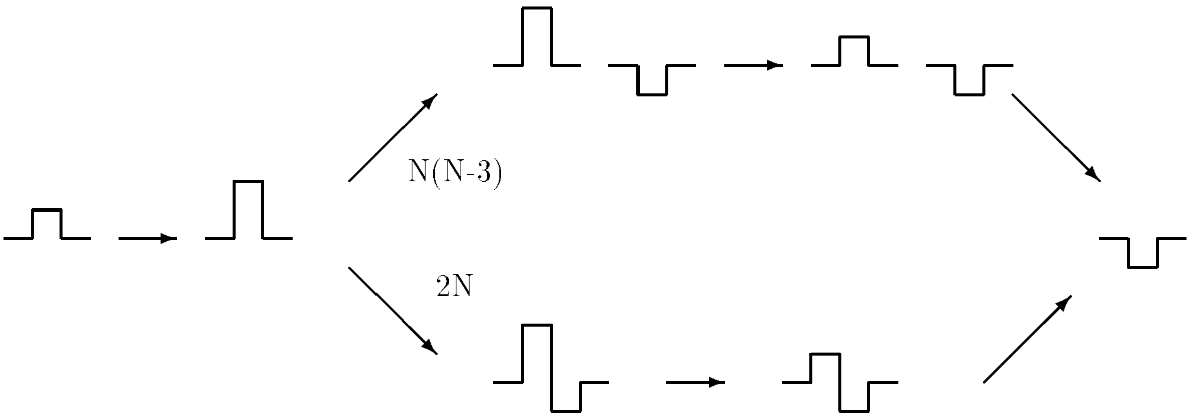


(wie Konfig. 5)

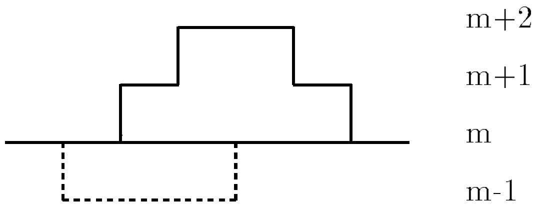
$$\frac{E_{12}}{N} = \frac{11}{120}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.149}$$



Konfig.7

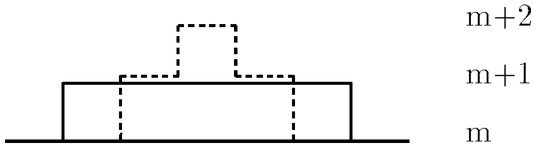


$$\frac{E_{13}}{N} = -\frac{43}{840} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.150}$$



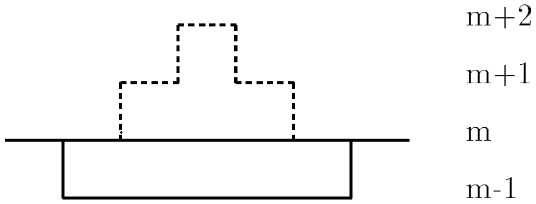
(wie Konfig. 7)

$$\frac{E_{14}}{N} = -\frac{43}{840} C_+ C_- \Big(D_+ + D_- \Big) \tag{3.151}$$

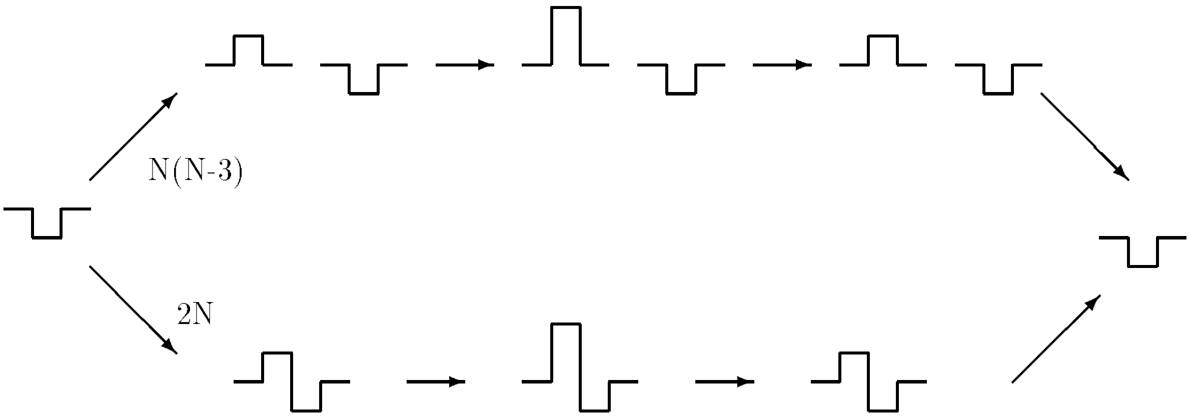


(wie Konfig. 1)

$$\frac{E_{15}}{N} = \frac{31}{60}\Big(C_+^2 D_+ + C_-^2 D_-\Big) \tag{3.152}$$



Konfig.8



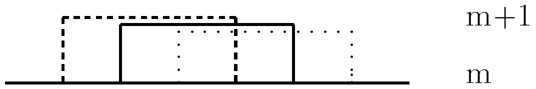
$$\frac{E_{16}}{N} = -\frac{149}{1260} C_+ C_- \Big(D_+ + D_-\Big) \tag{3.153}$$

Nun werden die Ergebnisse der 3-Loop Graphen zusammengefaßt. Zur Abkürzung verwenden wir die folgenden Definitionen:

$$\bar{C}: \;=\; C_+^3 + C_-^3 \qquad (3.154)$$

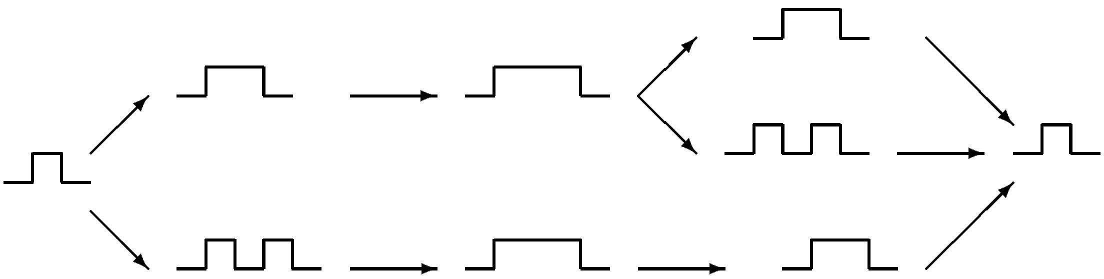
$$C^*: \;=\; C_+C_-\Big(C_+ + C_-\Big) \qquad (3.155)$$

Die Graphen werden nach der Reihenfolge der Loops mit Zahlenkombinationen benannt, so daß z.B. die Kombination 342 für einen Graphen mit einem dreier, dann einem vierer und schließlich mit einem zweier Loop steht. Die aus einer solchen Konfiguration durch Umklappen einzelner Loops entstehenden gemischten Zustände werden dann mit 342a bis 342c bezeichnet.



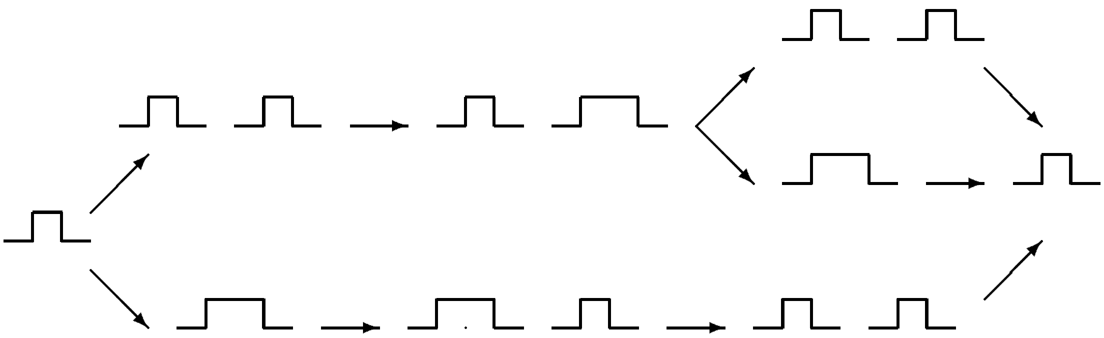
333

1.) Konfiguration mit drei nächsten Nachbarn:



$$\frac{E}{N} = 4\bar{C} \qquad (3.156)$$

2.) Konfiguration mit zwei nächsten Nachbarn:



$$\frac{E}{N} = -5\bar{C} \tag{3.157}$$

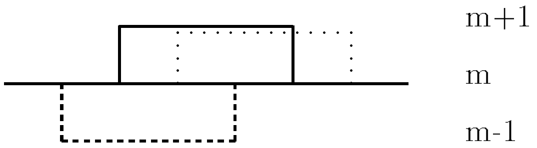
3.) Konfiguration ohne nächste Nachbarn:

$$\frac{E}{N} = \frac{5}{3}\bar{C} \tag{3.158}$$

Zusammenfassen der drei obigen Konfigurationen liefert insgesamt für den Graphen 333 den folgenden Energiebeitrag:

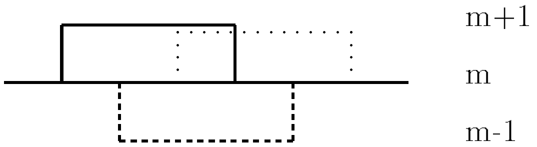
$$\frac{E}{N} = \frac{2}{3}\bar{C} \tag{3.159}$$

Die anderen Graphen berechnen sich nach der gleichen Methode. Im Folgenden werden nur noch die Graphen und der jeweils zugehörige Energiebeitrag aufgelistet.



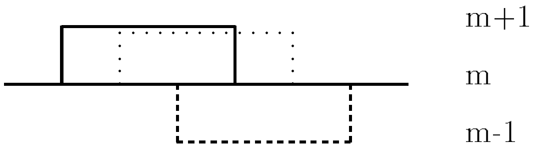
$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \tag{3.160}$$

333a



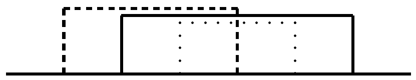
$$\frac{E}{N} = \frac{4}{15}C^* \tag{3.161}$$

333b



$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \tag{3.162}$$

333c



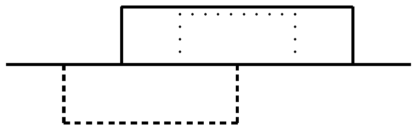
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{2}{3}\bar{C} \qquad (3.163)$$

342



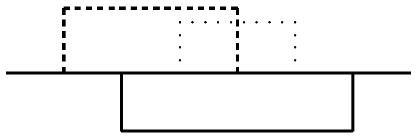
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \qquad (3.164)$$

342a



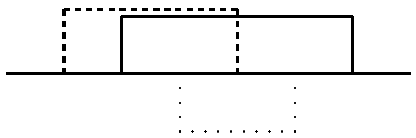
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{4}{15}C^* \qquad (3.165)$$

342b



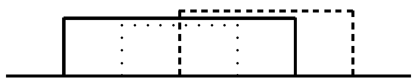
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \qquad (3.166)$$

342c



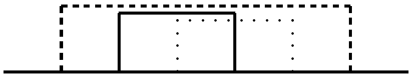
m+1

m

m-1 (wie Graph 342)

423

Entsprechend liefern die Graphen 423a bis 423c die gleichen Beiträge wie 342a bis 342c.



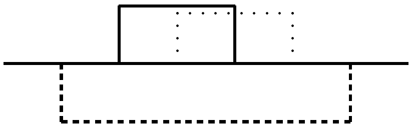
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{2}{3}\bar{C} \tag{3.167}$$

522



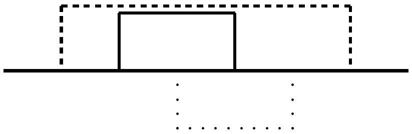
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{4}{15}C^* \tag{3.168}$$

522a



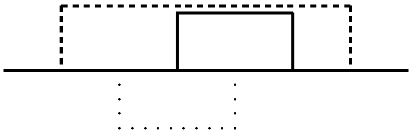
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \tag{3.169}$$

522b



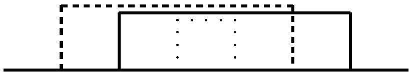
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{49}{90}C^* \tag{3.170}$$

522c



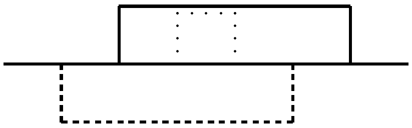
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{6}\bar{C} \tag{3.171}$$

441



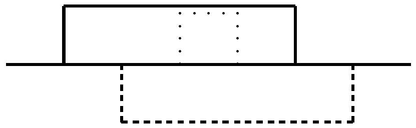
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{31}{135}C^* \tag{3.172}$$

441a



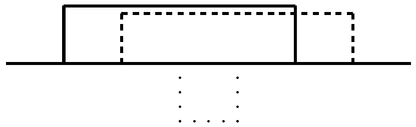
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{31}{135}C^* \tag{3.173}$$

441b



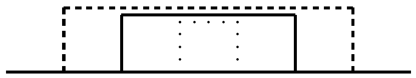
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{19}{10}C^* \tag{3.174}$$

441c



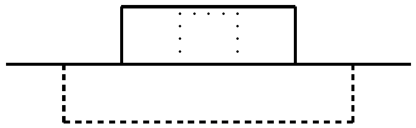
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{6}\bar{C} \tag{3.175}$$

531



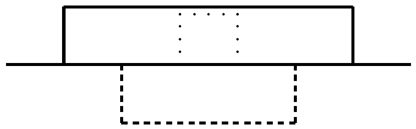
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{31}{135}C^* \tag{3.176}$$

531a



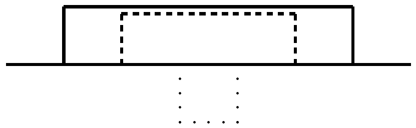
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{31}{135}C^* \tag{3.177}$$

531b



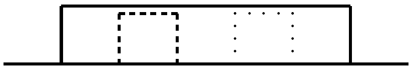
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{19}{10}C^* \tag{3.178}$$

531c



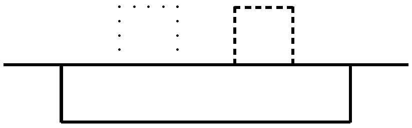
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{4}\bar{C} \tag{3.179}$$

511



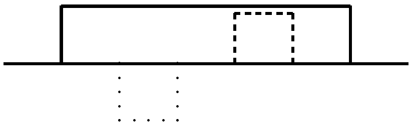
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{25}{36}C^{*} \tag{3.180}$$

511a



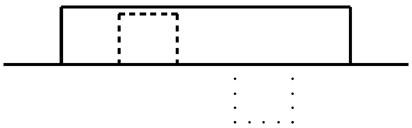
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^{*} \tag{3.181}$$

511b



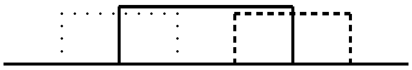
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^{*} \tag{3.182}$$

511c



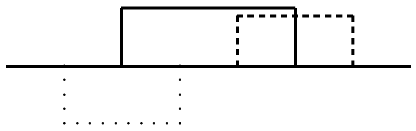
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{4}\bar{C} \tag{3.183}$$

232



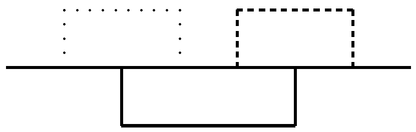
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^* \qquad (3.184)$$

232a



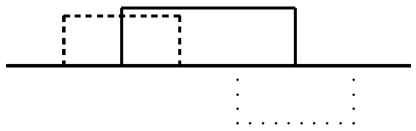
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{25}{36}C^* \qquad (3.185)$$

232b



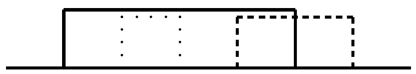
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^* \qquad (3.186)$$

232c



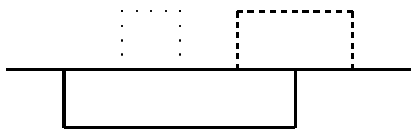
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{4}\bar{C} \qquad (3.187)$$

412



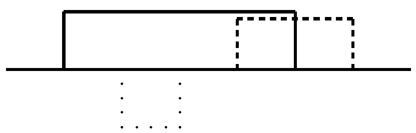
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = \frac{25}{36}C^* \qquad (3.188)$$

412a



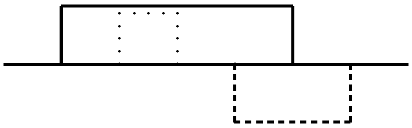
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^* \qquad (3.189)$$

412b



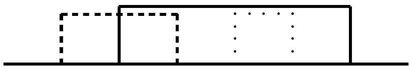
m+1

m

m-1

$$\frac{E}{N} = -\frac{5}{12}C^* \qquad (3.190)$$

412c



m+1

m

m-1 (wie Graph 412)

241

Entsprechend liefern die Graphen 241a bis 241c die gleichen Beiträge wie 421a bis 421c.

Summiert man schließlich alle 3-Loop Beiträge auf, so erhält man:

$$\frac{E}{N} = 4\bar{C} - \frac{908}{135}C^* \qquad (3.191)$$

Damit sind nun alle zur sechsten Ordnung beitragenden Terme bekannt. Für $E^{(6)}$ gilt:

$$E^{(6)} = \sum_{kjmlp}' \frac{< n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid l >< l \mid V \mid p >< p \mid V \mid n >}{\varepsilon_k \varepsilon_j \varepsilon_m \varepsilon_l \varepsilon_p}$$

$$E^{(6)} = -\frac{N}{64}\Big(\text{1-Loops} + \text{2-Loops} + \text{3-Loops}\Big)$$

Einsetzen der Beiträge ergibt schlielich:

$$\boxed{\begin{aligned} E^{(6)} \; = \; & -\frac{N}{64}\left\{\frac{1}{144}\Big(C_+D_+E_+ + C_-D_-E_-\Big) + \frac{1}{16}\Big(C_+D_+^2 + C_-D_-^2\Big)\right. \qquad (3.192) \\ & +\frac{47}{16}\Big(C_+^2D_+ + C_-^2D_-\Big) - \frac{1543}{1008}C_+C_-\Big(D_+ + D_-\Big) \\ & \left. +4\Big(C_+^3 + C_-^3\Big) - \frac{908}{135}C_+C_-\Big(C_+ + C_-\Big)\right\} \end{aligned}}$$

3.5 Berechnung der Koeffizienten a_{2n}

Um die in V' auftretenden Koeffizienten a_{2n} bis $n = 3$, d.h. bis zur sechsten Ordnung in γ zu berechnen, benötigen wir die Gesamtenergie E_{ges}. In diese werden die in vierter Ordnung erhaltenen Koeffizienten eingesetzt:

$$a'_{2n} = \sum_{j=0}^{\infty} a_{2n}^{(2j)} \gamma^{2j+1} \tag{3.193}$$

$$a_{2n} = \gamma a'_{2n} \tag{3.194}$$

Bis zur vierten Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{1}{2}\gamma^2 + \Big(\frac{10s(s+1) - 25}{96}\Big)\gamma^4 + \ldots && (3.195) \\ a_4 &= -\frac{5}{96}\gamma^4 + \ldots && (3.196) \end{aligned}$$

Dies stimmt mit den Ergebnissen von D. Sen [24] überein. Die Gesamtenergie hat nach Einsetzen obiger Koeffizienten die folgende Form:

$$\begin{aligned} E_{ges} := \; & \frac{1}{30240}\Big(30240 m^6 a_6^{(4)} - 1181 m^6 + 3543 m^4 s(s+1) + 30240 m^4 a_4^{(4)} \\ & -12514 m^4 - 3543 m^2 [s(s+1)]^2 + 4789 m^2 s(s+1) + 30240 m^2 a_2^{(4)} \\ & +8970 m^2 + 1181 [s(s+1)]^3 + 165 [s(s+1)]^2 - 5985 s(s+1)\Big) \end{aligned} \tag{3.197}$$

Mit Hilfe eines REDUCE-Programms führen wir nun einen Koeffizientenvergleich nach Potenzen von m durch. Damit tragen wir der Forderung nach Aufrechterhaltung der m-Entartung Rechnung. Schließlich erhalten wir das folgende Ergebnis:

$$\begin{aligned} a_6^{(4)} &= \frac{1181}{30240} \\ a_4^{(4)} &= \frac{-3543 s(s+1) + 12514}{30240} \\ a_2^{(4)} &= \frac{3543 [s(s+1)]^2 - 4789 s(s+1) - 8970}{30240} \end{aligned} \tag{3.198}$$

In sechster Ordnung gilt somit:

$$a_2 = -\frac{1}{2}\gamma^2 + \Big(\frac{10s(s+1)-25}{96}\Big)\gamma^4 + \Big(\frac{3543[s(s+1)]^2 - 4789s(s+1) - 8970}{30240}\Big)\gamma^6 + \ldots$$

$$a_4 = -\frac{5}{96}\gamma^4 + \Big(\frac{-3543s(s+1)+12514}{30240}\Big)\gamma^6 + \ldots$$

$$a_6 = \frac{1181}{30240}\gamma^6 + \ldots$$

Für verschiedene Spinwerte erhält man die Koeffizienten a_2 und a_4 als Funktion von γ:

$$\begin{aligned}
a_2(s=1/2) &= -6263/17920\gamma^6 - 35/192\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=1/2) &= 39427/120960\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=1) &= -547/3780\gamma^6 - 5/96\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=1) &= 1357/7560\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=3/2) &= 24421/32256\gamma^6 + 25/192\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=3/2) &= -3089/120960\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=2) &= 7487/2520\gamma^6 + 35/96\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=2) &= -1093/3780\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=5/2) &= 705239/96768\gamma^6 + 125/192\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=5/2) &= -73949/120960\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=3) &= 24653/1680\gamma^6 + 95/96\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=3) &= -2143/2160\gamma^6 - 5/96\gamma^4 \\
a_2(s=7/2) &= 4237273/161280\gamma^6 + 265/192\gamma^4 - 1/2\gamma^2 \\
a_4(s=7/2) &= -173153/120960\gamma^6 - 5/96\gamma^4
\end{aligned}$$

In sechster Ordnung erhält man einen vierdimensionalen Parameterraum mit γ, a_2, a_4, a_6. Die Projektionen der kritischen Kurven auf die Ebene $a_4 = a_6 = 0$ sind im Anhang in den Figuren 1.1 bis 1.5 dargestellt. Die oben berechneten Funktionen $a_2(\gamma)$ werden mit Daten aus finite-size-scaling (FSS) Rechnungen verglichen [13] [22]. Insgesammt erkennt man, daß die mit diesen beiden Methoden ermittelten Phasengrenzen in der Nähe der zu erwartenden kritischen Punkte sehr gut übereinstimmen. (Kritische Werte sind in den Figuren 2.2 bis 2.4 eingetragen.)

Besonders gut ist die Übereinstimmung mit den FFS-Daten für Spin 1 (Fig.1.1). Bei höheren Spins besitzen die Koeffizienten von γ^4 und γ^6 der Funktionen $a_2(\gamma)$ positives Vorzeichen, so daß die Funktionen nach Durchlaufen eines Minimums gegen Unendlich streben. Mit wachsendem Spin werden die Kurven steiler und die Abweichungen von den FSS-Werten werden größer. In Fig. 1.5 ist der Verlauf der kritischen Kurven für Spin 1/2 bis 5/2 in Vergleich dargestellt.

4 Störungsrechnung mit Magnetfeld

4.1 Definition des erweiterten Hamiltonians mit Magnetfeld

Unser nächstes Ziel ist es, Ordnungsparameter zu berechnen, um die $(2s+1)$-verschiedenen Phasen zu charakterisieren. Dazu verwenden wir den Erwartungswert von S_z , der als Magnetisierung bezeichnet wird. Diese erhalten wir, indem wir den im vorhergehenden Abschnitt betrachteten Hamiltonian um ein longitudinales Magnetfeld erweitern [24], dessen Stärke durch den Parameter ϑ beschrieben wird. Dieser neue Hamiltonian werde mit $H_Q(\vartheta)$ bezeichnet:

$$H_Q(\vartheta) = H_Q + \sum_i \vartheta S_{iz} \tag{4.1}$$

Wobei H_Q der schon bekannte Operator ist, dessen Energieeigenwerte im vorherigen Teil durch Störungsrechnung ermittelt wurden.

$$H_Q = \sum_i \Big[\frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 + \gamma S_{ix} + \sum_{n=1}^{[s]} a'_{2n} S_{iz}^{2n}\Big] \tag{4.2}$$

Die Spin-Operatoren sind wieder gegeben durch:

$$S_z \mid s, m >= m \mid s, m > \tag{4.3}$$

$$S_\pm = S_x \pm i S_y \tag{4.4}$$

$$S_\pm \mid s, m > \;=\; \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} \mid s, m \pm 1 > \tag{4.5}$$

Um die Eigenwerte von $H_Q(\vartheta)$ zu erhalten, betreiben wir wieder Störungstheorie in γ. Dazu übernehmen wir die Definition des Störpotentials $\tilde{V}$ aus dem vorhergehenden Abschnitt:

$$\tilde{V} := V + V' \tag{4.6}$$

mit

$$V = S_x \tag{4.7}$$

und

$$V' = \sum_i \sum_{n=1}^{[s]} a'_{2n} S_{iz}^{2n} \tag{4.8}$$

Die Koeffizienten a'_{2n} bleiben unverändert. Die Entwicklung nach γ lautet:

$$a'_{2n} = \sum_{j=o}^{\infty} a_{2n}^{(2j)} \gamma^{2j+1} \tag{4.9}$$

Der ungestörte Anteil H_0 wird hingegen um den das Magnetfeld enthaltenden Term erweitert und $\tilde{H}_0$ genannt, so daß gilt:

$$\begin{aligned} H_0 : &= \sum_i \frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 && (4.10) \\ \tilde{H}_0 : &= \sum_i \frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 + \vartheta S_{iz} && (4.11) \end{aligned}$$

Diese Definitionen legen den Verlauf der Rechnung mit Magnetfeld fest. Dieser ist so gewählt, daß die graphischen Darstellungen der von $S_{\pm}$ erzeugten Spin-Flip Kombinationen unverändert bleiben. Gleiches gilt auch für die den Verlauf der Wechselwirkung repräsentierenden Flußdiagramme. Der entscheidende Unterschied zur Rechnung ohne Feld besteht in den Eigenwerten des Operators $\tilde{H}_0$, denn diese ergeben sich nun als Funktion von ϑ.

4.2 Berechnung der Eigenwerte des ungestörten Anteils $\tilde{H}_0$

Im folgenden werden einige Beispiele für die Berechnung der neuen ungestörten Energien gegeben:

Für den Grundzustand erhält man:

$$\mid n >:=\mid s_1 = m, \dots s_N = m > \tag{4.12}$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 \mid n > &= H_0 \mid n > + \vartheta \sum_i S_{iz} \mid n > && (4.13) \\ &= 0 \mid n > + \vartheta N m \mid n > && (4.14) \\ &= \vartheta N m \mid n > \\ \Rightarrow \tilde{\varepsilon}_0 &= \vartheta m N \end{aligned}$$

1-flip-Zustände:

$$| m >:= \sum_j \lambda_j \mid s_1 = m, \ldots s_{j-1} = m, s_j = m \pm 1, s_{j+1} = m \ldots s_N = m > \tag{4.15}$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 \mid m > &= H_0 \mid m > + \vartheta \sum_{i,j} S_{iz} \mid m > \qquad (4.16) \\ &= 1 \mid m > + \vartheta[(m \pm 1) + (N-1)m] \mid m > \qquad (4.17) \\ &= [1 + \vartheta(Nm \pm 1)] \mid m > \\ \Rightarrow \tilde{\varepsilon}_m &= 1 + \vartheta(mN \pm 1) \end{aligned}$$

2-flip-Zustände: Als Beispiel sei die Berechnung von $\tilde{\varepsilon}_4$ angegeben:

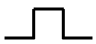
$$| j_4 >:= \sum_{j,k} \lambda_{j,k} \mid m, \ldots, s_j = m \pm 1, \ldots, s_k = m \pm 1, \ldots m > \tag{4.18}$$

Wobei die Einschränkung $j \neq k$ und $j \neq k \pm 1$ gelte.

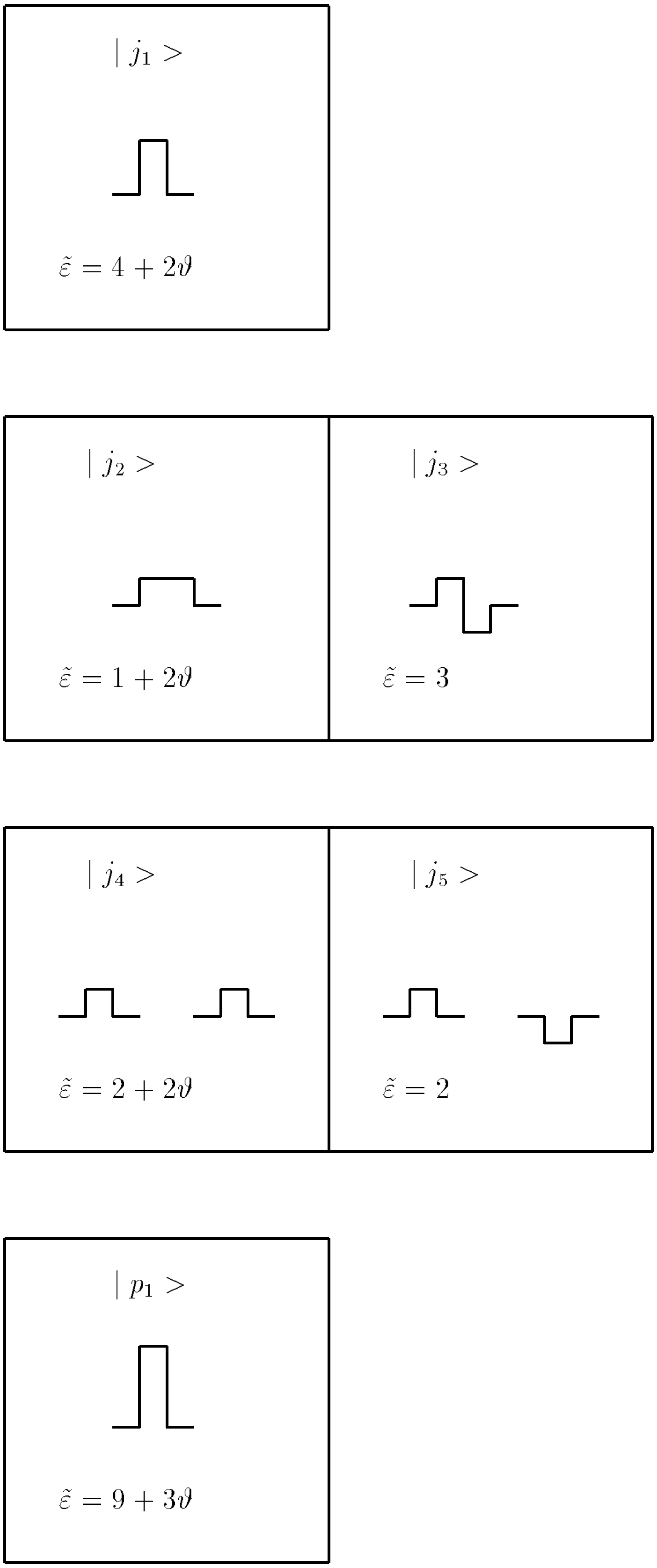
$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 \mid j_4 > &= H_0 \mid j_4 > + \vartheta \sum_{i,j,k} S_{iz} \mid j_4 > \qquad (4.19) \\ &= 2 \mid j_4 > + \vartheta[2(m \pm 1) + (N-2)m] \mid j_4 > \qquad (4.20) \\ &= [2 + \vartheta(Nm \pm 2)] \mid j_4 > \\ \Rightarrow \tilde{\varepsilon}_{j_4} &= 2 + \vartheta(Nm \pm 2) \end{aligned}$$

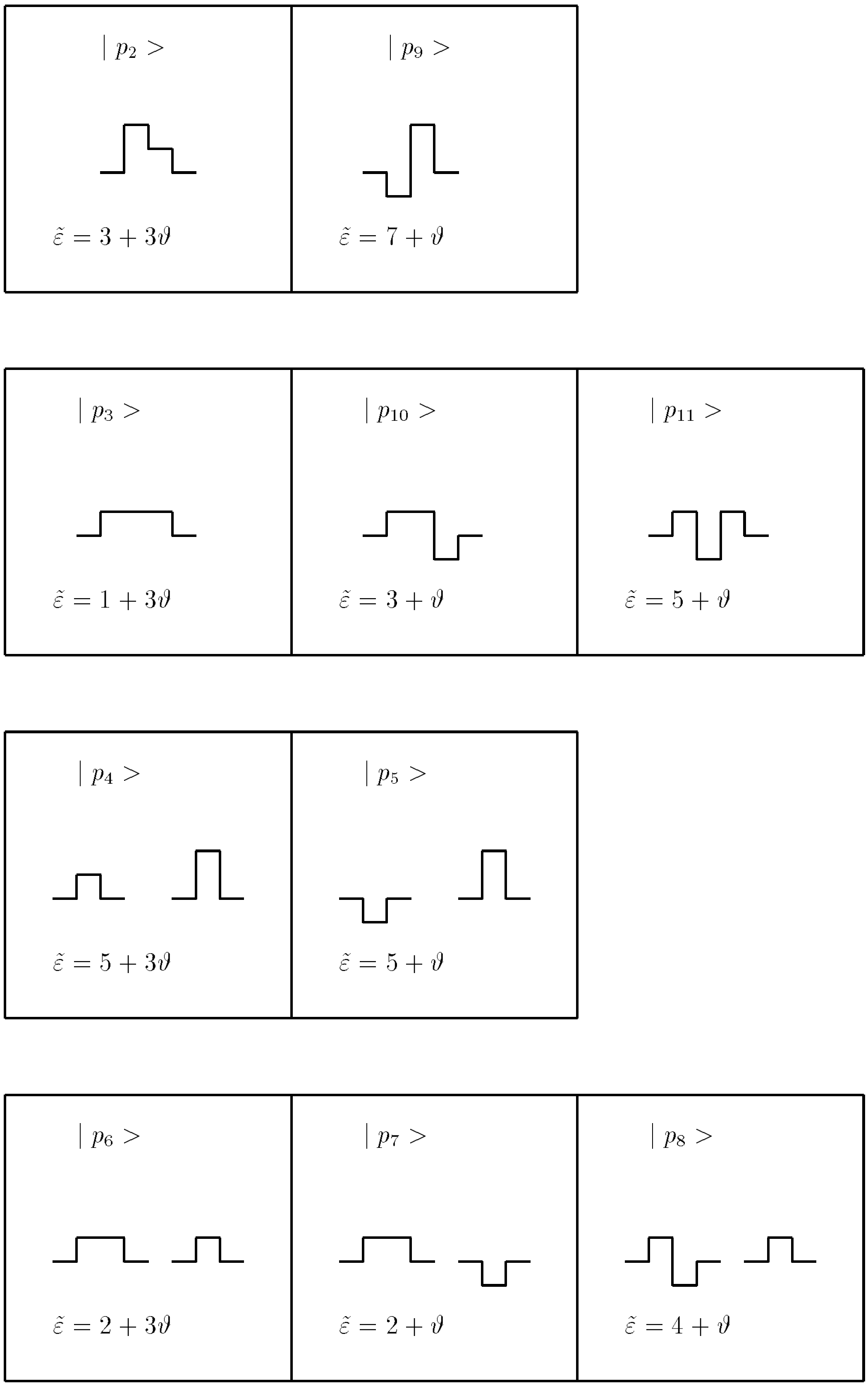
Die Berechnung der weiteren ungestörten Energien verläuft analog. Im folgenden werden stets Differenzen der Form $\tilde{\varepsilon} := \tilde{\varepsilon}_m - \tilde{\varepsilon}_0$ gebraucht. Daher fasse ich die Ergebnisse in folgender Weise zusammen:

$| m >$

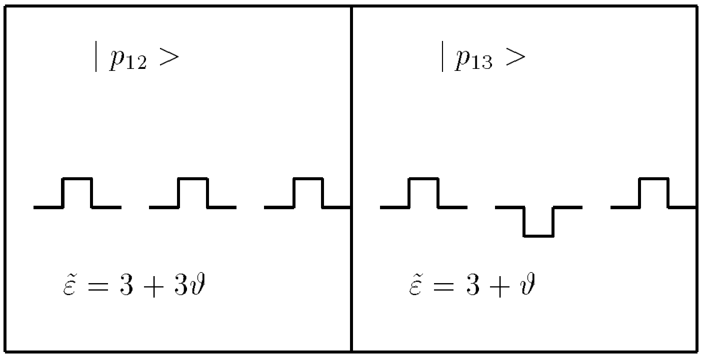


$\tilde{\varepsilon} = 1 + \vartheta$

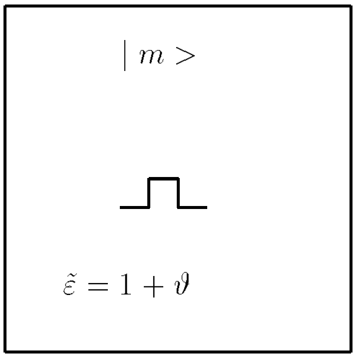

$| j_1 >$
$\tilde{\varepsilon} = 4 + 2\vartheta$
$| j_2 >$
$\tilde{\varepsilon} = 1 + 2\vartheta$
$| j_3 >$
$\tilde{\varepsilon} = 3$
$| j_4 >$
$\tilde{\varepsilon} = 2 + 2\vartheta$
$| j_5 >$
$\tilde{\varepsilon} = 2$
$| p_1 >$
$\tilde{\varepsilon} = 9 + 3\vartheta$



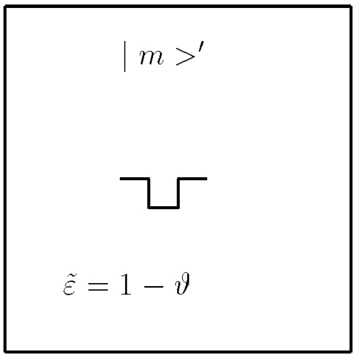
$| p_2 >$
$\tilde{\varepsilon} = 3 + 3\vartheta$
$| p_9 >$
$\tilde{\varepsilon} = 7 + \vartheta$
$| p_3 >$
$\tilde{\varepsilon} = 1 + 3\vartheta$
$| p_{10} >$
$\tilde{\varepsilon} = 3 + \vartheta$
$| p_{11} >$
$\tilde{\varepsilon} = 5 + \vartheta$
$| p_4 >$
$\tilde{\varepsilon} = 5 + 3\vartheta$
$| p_5 >$
$\tilde{\varepsilon} = 5 + \vartheta$
$| p_6 >$
$\tilde{\varepsilon} = 2 + 3\vartheta$
$| p_7 >$
$\tilde{\varepsilon} = 2 + \vartheta$
$| p_8 >$
$\tilde{\varepsilon} = 4 + \vartheta$



Somit sind die durch das Magnetfeld modifizierten ungestörten Energien bekannt. Die Gewichtung der zugehörigen Konfiguration, d.h. die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten auf der Spin-Kette, ändert sich durch das zusätzliche Feld nicht. Die Rechnung verläuft nun analog zu der vorher ausgeführten Störungsrechnung ohne Magnetfeld. Dabei ist allerdings zu beachten, daß durch Spiegelung der Spin- Zustände an der m-Linie jetzt die Energien $\tilde{\varepsilon}$ geändert werden. Dabei bewirkt eine m-Spiegelung eine Vorzeichenumkehr von ϑ. Für den 1-Flip-Zustand gilt demnach:



Für den gespiegelten Zustand erhält man:



4.3 Berechnung der Energiebeiträge bis zur 6. Ordnung

Wir verwenden wieder einen Potenzreihenansatz für die Energie, die hier mit $\tilde{E}$ bezeichnet werde.

$$\tilde{E} := \gamma \tilde{E}^{(1)} + \gamma^2 \tilde{E}^{(2)} + \gamma^3 \tilde{E}^{(3)} + \gamma^4 \tilde{E}^{(4)} + \gamma^5 \tilde{E}^{(5)} + \gamma^6 \tilde{E}^{(6)} \tag{4.21}$$

Wobei die $\tilde{E}^{(n)}$ die jeweiligen Beiträge in n-ter Ordnung zur Störungsentwicklung in γ sind, die im Folgenden berechnet werden sollen.

In erster Ordnung erhält man:

$$\tilde{E}^{(1)} \quad = \quad < n \mid \tilde{V} \mid n > \tag{4.22}$$

Das Ergebnis in erster Ordnung ist unabhängig von ϑ und wir erhalten das bereits bekannte Ergebnis:

$$\boxed{\tilde{E}^{(1)} = N \sum_n a_{2n} m^{2n} \qquad (4.23)}$$

In zweiter Ordnung gilt:

$$\tilde{E}^{(2)} = {\sum_m}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m} \tag{4.24}$$

Daraus erhält man:

$$\boxed{\tilde{E}^{(2)} = -\frac{1}{4} N \left\{ \frac{C_+}{1+\vartheta} + \frac{C_-}{1-\vartheta} \right\} (4.25)}$$

Wobei die Normierungsfaktoren wie vorher definiert sind:

$$C_\pm := s(s+1) - m(m \pm 1) \tag{4.26}$$

In dritter Ordnung ergibt sich, unter ausschließlicher Berücksichtigung des Terms, der proportional zu N ist, der folgende Beitrag:

$$\tilde{E}^{(3)} \quad = \quad {\sum_{j,m}}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)} \tag{4.27}$$

Daraus erhält man:

$$\boxed{\tilde{E}^{(3)} = \frac{1}{4} N \left\{ \frac{C_+ W_+}{(1+\vartheta)^2} + \frac{C_- W_-}{(1-\vartheta)^2} \right\} \quad (4.28)}$$

Wobei:

$$W_\pm := V'(m \pm 1) - V'(m) \tag{4.29}$$

In vierter Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{E}^{(4)} &= \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)} \\ &\quad - \sum_{j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >< n \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)^2} \end{aligned} \tag{4.30}$$

Wobei hier wie auch in Folgenden nur Terme berücksichtigt werden, die proportional zu N sind. Um die Summanden getrennt zu berechnen, verwenden wir die folgenden Abkürzungen:

$$\tilde{B} : = -\sum_{j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >< n \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)^2} \tag{4.31}$$

$$\tilde{C} : = \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)} \tag{4.32}$$

Für den Term $\tilde{B}$ gilt in Analogie zu $\tilde{E}^{(3)}$:

$$\tilde{B} = \frac{1}{4} N V'(m) \left\{ \frac{W_+ C_+}{(1+\vartheta)^3} + \frac{W_- C_-}{(1-\vartheta)^3} \right\} \tag{4.33}$$

Der Summand $\tilde{C}$ laßt sich wie folgt vereinfachen:

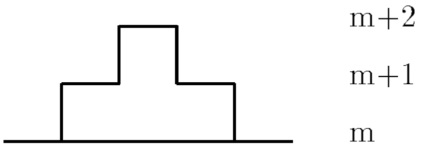
$$\tilde{C} = \tilde{C}_1 + \tilde{C}_2 \tag{4.34}$$

mit

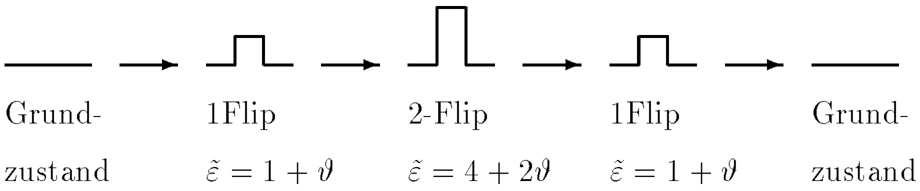
$$\tilde{C}_1 : = \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid V \mid k >< k \mid V \mid j >< j \mid V \mid m >< m \mid V \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)} \tag{4.35}$$

$$\tilde{C}_2 : = \sum_{k,j,m}{}' \frac{< n \mid V \mid k >< k \mid V' \mid j >< j \mid V' \mid m >< m \mid V \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)} \tag{4.36}$$

$\tilde{C}_1$ enthält 2-Flip-Konfigurationen, die sich mit Hilfe der graphischen Darstellungen berechnen laßen, die schon für die Störungsrechnung ohne Magnetfeld verwendet wurden. Als Beispiele seien hier die ersten zwei Graphen betrachtet:



Zu diesem Graphen gehört das folgende Flußdiagramm:



Daraus erhält man den folgenden Energiebeitrag:

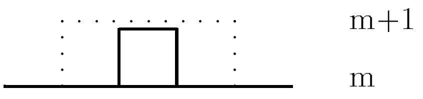
$$\frac{\tilde{E}_1}{N} = \frac{1}{4}\left\{\frac{C_+D_+}{(1+\vartheta)^2(4+2\vartheta)} + \frac{C_-D_-}{(1-\vartheta)^2(4-2\vartheta)}\right\} \tag{4.37}$$

Mit

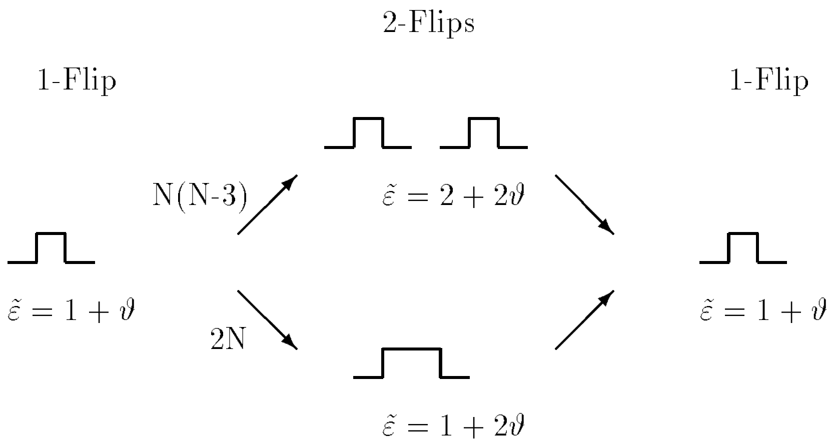
$$D_\pm := s(s+1) - (m \pm 1)(m \pm 2) \tag{4.38}$$

Wobei der zweite Summand den durch Spiegelung erzeugten Beitrag berücksichtigt.

Der folgende Graph repräsentiert eine 2-Loop-Wechselwirkung:



Zu diesem Graphen gehört das folgende Flußdiagramm:



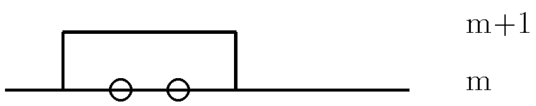
Daraus ergibt sich der Energiebeitrag:

$$\frac{\tilde{E}_2}{N} = \frac{C_+^2}{(1+\vartheta)^2}\left\{\frac{2}{1+2\vartheta} - \frac{3}{2+2\vartheta}\right\} + \frac{C_-^2}{(1-\vartheta)^2}\left\{\frac{2}{1-2\vartheta} - \frac{3}{2-2\vartheta}\right\} \tag{4.39}$$

Die weiteren Graphen berechnen sich ebenso, indem man auf die schon bekannten Flußdiagramme zurückgreift und die entsprechenden magnetfeldabhängigen Energieeigenwerte $\tilde{\varepsilon}$ einsetzt. Nach Summation aller Beiträge erhält man:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_1 = & -\frac{1}{16}N\left\{\frac{C_+D_+}{(1+\vartheta)^2(4+2\vartheta)} + \frac{C_-D_-}{(1-\vartheta)^2(4-2\vartheta)}\right. \\ & +\frac{2C_+^2}{(1+\vartheta)^2}\left[\frac{2}{1+2\vartheta} - \frac{3}{2+2\vartheta}\right] + \frac{2C_-^2}{(1-\vartheta)^2}\left[\frac{2}{1-2\vartheta} - \frac{3}{2-2\vartheta}\right] \\ & \left. -\frac{5}{6}C_+C_-\left[\frac{1}{(1+\vartheta)^2} + \frac{1}{(1-\vartheta)^2} + \frac{2}{1-\vartheta^2}\right]\right\} \end{aligned} \tag{4.40}$$

Der Term $\tilde{C}_2$ läßt sich auf folgende Weise graphisch veranschaulichen:



Dieser liefert den folgenden Beitrag:

$$\tilde{C}_2 = -\frac{1}{4}N\left\{\frac{C_+W_+^2}{(1+\vartheta)^3} + \frac{C_-W_-^2}{(1-\vartheta)^3}\right\} \tag{4.41}$$

Der gesamte Beitrag zu $E^{(4)}$ ergibt sich schließlich durch Summation der Anteile A, B und C :

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{E}^{(4)}}{N} &= -\frac{1}{16}\left\{\frac{C_+D_+}{(1+\vartheta)^2(4+2\vartheta)}+\frac{C_-D_-}{(1-\vartheta)^2(4-2\vartheta)}\right.\\ &+\frac{2C_+^2}{(1+\vartheta)^2}\left[\frac{2}{1+2\vartheta}-\frac{3}{2+2\vartheta}\right]+\frac{2C_-^2}{(1-\vartheta)^2}\left[\frac{2}{1-2\vartheta}-\frac{3}{2-2\vartheta}\right]\\ &\left.-\frac{5}{6}C_+C_-\left[\frac{1}{(1+\vartheta)^2}+\frac{1}{(1-\vartheta)^2}+\frac{2}{1-\vartheta^2}\right]\right\}\\ &-\frac{1}{4}\left\{\frac{C_+W_+^2}{(1+\vartheta)^3}+\frac{C_-W_-^2}{(1-\vartheta)^3}\right\}+\frac{1}{4}V'(m)\left\{\frac{W_+C_+}{(1+\vartheta)^3}+\frac{W_-C_-}{(1-\vartheta)^3}\right\}\end{aligned}\tag{4.42}$$

In fünfter Ordnung erhält man:

$$\tilde{E}^{(5)}=\sum_{k,j,m,l}{}' \frac{<n\mid\tilde{V}\mid k><k\mid\tilde{V}\mid j><j\mid\tilde{V}\mid m><m\mid\tilde{V}\mid l><l\mid\tilde{V}\mid n>}{(\tilde{\varepsilon}_n-\tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n-\tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n-\tilde{\varepsilon}_m)(\tilde{\varepsilon}_n-\tilde{\varepsilon}_l)}\tag{4.43}$$

Dieser Energiebeitrag wird wie in der Rechnung ohne Magnetfeld aufgeteilt und durch Graphen veranschaulicht. Das Einsetzen der Normierungsfaktoren $C_\pm, D_\pm, E_\pm, W_\pm$ u.s.w. und Summieren der Beiträge wird von einem REDUCE-Programm übernommen. Als Ergebnis erhält man:

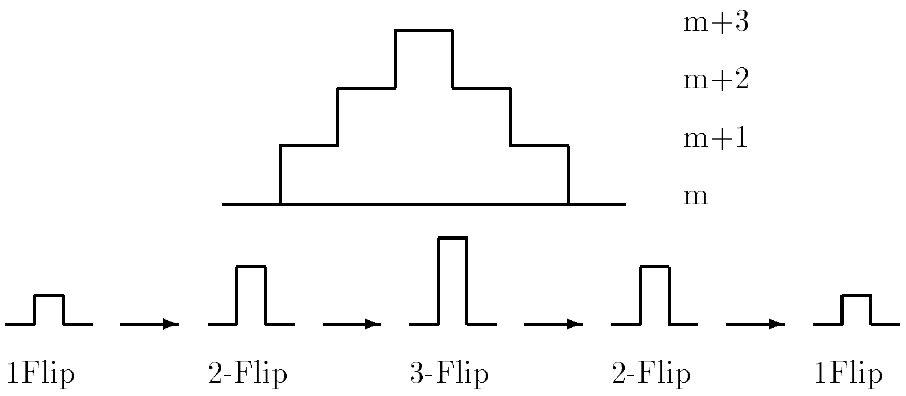
$$\begin{aligned}\tilde{E}^{(5)} &= -[6(64S^2\vartheta^{10}-392S^2\vartheta^8-9728S^2\vartheta^6\\ &+35918S^2\vartheta^4-6088S^2\vartheta^2-2278S^2+1056S\vartheta^{10}\\ &+120S\vartheta^8-2346S\vartheta^6-19308S\vartheta^4+42S\vartheta^2+2940S\\ &-528\vartheta^{10}+1128\vartheta^8+1119\vartheta^6-2658\vartheta^4+1059\vartheta^2\\ &-120)m\vartheta-(64S\vartheta^2+3696S\vartheta^{10}+96048S\vartheta^8\\ &-261134S\vartheta^6-284892S\vartheta^4+125874S\vartheta^2+5416S\\ &-1696\vartheta^2-14568\vartheta^{10}+46836\vartheta^8+4379\vartheta^6+27546\vartheta^4\\ &-7317\vartheta^2-2692)m^2-12(64S\vartheta^{10}-392S\vartheta^8\\ &-9728S\vartheta^6+35918S\vartheta^4-6088S\vartheta^2-2278S+560\vartheta^{10}\\ &+2240\vartheta^8-6145\vartheta^6-16319\vartheta^4-863\vartheta^2+3031)m^3\vartheta\\ &+(32\vartheta^2+4008\vartheta^{10}+77724\vartheta^8-224797\vartheta^6-224310\vartheta^4\\ &+99819\vartheta^2+5084)m^4+(32\vartheta^2-312\vartheta^{10}+18324\vartheta^8\\ &-36337\vartheta^6-60582\vartheta^4+26055\vartheta^2+332)S^2\\ &+12(32\vartheta^{10}-196\vartheta^8-4864\vartheta^6+17959\vartheta^4\\ &-3044\vartheta^2-1139)m^5\vartheta-18(2\vartheta^6+17\vartheta^4\\ &-43\vartheta^2-12)(2\vartheta+1)^2(2\vartheta-1)^2(\vartheta+1)(\vartheta-1)S]\\ &1/[144(2\vartheta+1)^2(2\vartheta-1)^2(\vartheta+2)^2(\vartheta+1)^4(\vartheta-1)^4(\vartheta-2)^2]\end{aligned}$$

Wobei $S := s(s+1)$ ist.

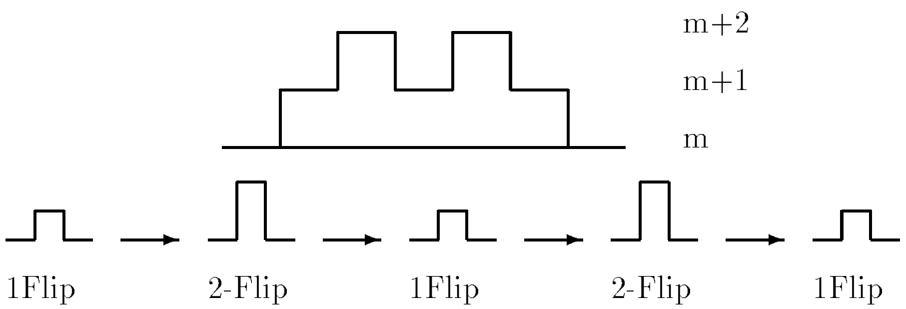
In sechster Ordnung erhält man:

$$\tilde{E}^{(6)} = \sum_{kjmlp}{}' \frac{< n \mid \tilde{V} \mid k >< k \mid \tilde{V} \mid j >< j \mid \tilde{V} \mid m >< m \mid \tilde{V} \mid l >< l \mid \tilde{V} \mid p >< p \mid \tilde{V} \mid n >}{(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_k)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_j)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_m)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_l)(\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_p)}$$

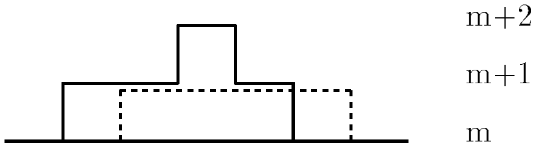
Die Beiträge werden wieder automatisch Summiert. Als Beispiel für die Rechenmethoden führen wir hier die Berechnung der 1-Loop- , eines 2-Loop- und eines 3-Loop-Graphen explizit durch.



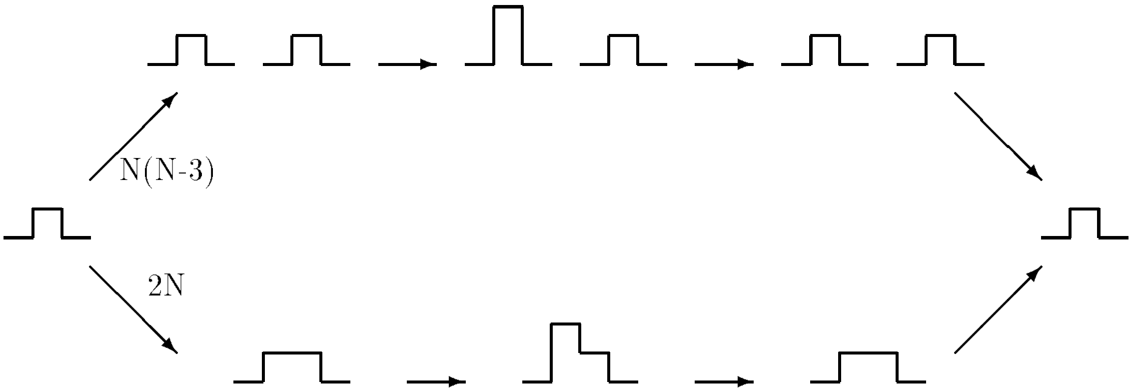
$$\frac{\tilde{E}_1}{N} = \frac{C_+ D_+ E_+}{(1+\vartheta)^2(4+2\vartheta)^2(9+3\vartheta)} + \frac{C_- D_- E_-}{(1-\vartheta)^2(4-2\vartheta)^2(9-3\vartheta)} \tag{4.44}$$



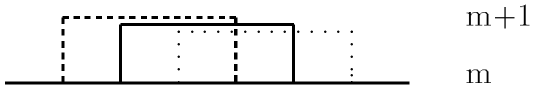
$$\frac{\tilde{E}_2}{N} = \frac{C_+ D_+^2}{(1+\vartheta)^3(4+2\vartheta)^2} + \frac{C_- D_-^2}{(1-\vartheta)^3(4-2\vartheta)^2} \tag{4.45}$$



Konfig.1

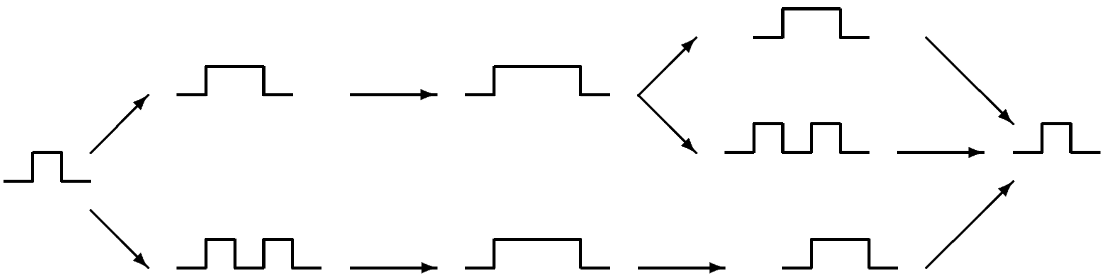


$$
\begin{aligned}
\frac{E_1}{N} = & \; C_+^2 D_+ \; \left\{ \frac{2}{(1+\vartheta)^2(1+2\vartheta)^2(3+3\vartheta)} - \frac{3}{(1+\vartheta)^2(2+2\vartheta)^2(5+3\vartheta)} \right\} \\
+ & \; C_-^2 D_- \; \left\{ \frac{2}{(1-\vartheta)^2(1-2\vartheta)^2(3-3\vartheta)} - \frac{3}{(1-\vartheta)^2(2-2\vartheta)^2(5-3\vartheta)} \right\}
\end{aligned}
\tag{4.46}
$$



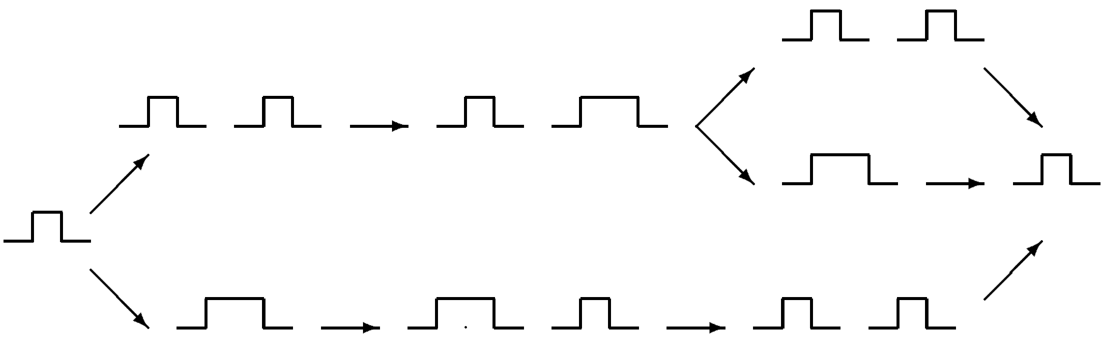
333

1.) Konfiguration mit drei nächsten Nachbarn:



$$\frac{\tilde{E}}{N} = \bar{C}\left\{\frac{2}{(1+\vartheta)^2(1+2\vartheta)^2(1+3\vartheta)} + \frac{4}{(1+\vartheta)^2(1+2\vartheta)(1+3\vartheta)(2+2\vartheta)}\right\} \tag{4.47}$$

2.) Konfiguration mit zwei nächsten Nachbarn:



$$\frac{\tilde{E}}{N} = -4\bar{C}\left\{\frac{2}{(1+\vartheta)^2(2+2\vartheta)^2(2+3\vartheta)} + \frac{4}{(1+\vartheta)^2(2+2\vartheta)(2+3\vartheta)(1+2\vartheta)}\right\} \tag{4.48}$$

3.) Konfiguration ohne nächste Nachbarn:

$$\frac{\tilde{E}}{N} = \bar{C}\frac{20}{(1+\vartheta)^2(2+2\vartheta)^2(3+3\vartheta)} \tag{4.49}$$

Mit $\bar{C} := C_+^3 + C_-^3$.
Wobei die Faktoren -4 für die Konfigurationen mit zwei nächsten Nachbarn bzw. 20 für solche mit drei getrennten Spins aus der Abzählung der Zustände resultieren. Dabei werden wieder nur Terme proportional zu N berücksichtigt. Summation über die verschiedenen Anordnungsmöglichkeiten der Spin-Flips ergibt den Gesamtbeitrag zum Graphen 333 . Die weiteren Graphen lassen sich analog behandeln.

Insgesamt erhält man für die sechste Ordnung, unter Berücksichtigung aller Terme, die proportional zu γ^6 sind, das folgende Ergebnis:

$$
\begin{aligned}
\tilde{E}_{ges} \;=\; & -(29376m^6\vartheta^{18} - 1887072m^6\vartheta^{16} + 42208956m^6\vartheta^{14} \\
& -463104264m^6\vartheta^{12} + 2503360020m^6\vartheta^{10} + 2233082016m^6\vartheta^8 \\
& -27129854172m^6\vartheta^6 + 5848801176m^6\vartheta^4 + 630043596m^6\vartheta^2 \\
& -1984080m^6 + 19008m^5\vartheta^{23} - 1749984m^5\vartheta^{21} + 50694756m^5\vartheta^{19} \\
& -574113596m^5\vartheta^{17} + 2860674988m^5\vartheta^{15} - 7511727740m^5\vartheta^{13} \\
& +19293468436m^5\vartheta^{11} - 62509789268m^5\vartheta^9 + 98528841028m^5\vartheta^7 \\
& +8988529324m^5\vartheta^5 - 10056901544m^5\vartheta^3 - 50032064m^5\vartheta \\
& -88128m^4S\vartheta^{18} + 5661216m^4S\vartheta^{16} - 126626868m^4S\vartheta^{14} \\
& +1389312792m^4S\vartheta^{12} - 7510080060m^4S\vartheta^{10} - 6699246048m^4S\vartheta^8 \\
& +81389562516m^4S\vartheta^6 - 17546403528m^4S\vartheta^4 - 1890130788m^4S\vartheta^2 \\
& +5952240m^4S - 10800m^4\vartheta^{24} + 1027128m^4\vartheta^{22} - 31775587m^4\vartheta^{20} \\
& +410406614m^4\vartheta^{18} - 2595673960m^4\vartheta^{16} + 10397347178m^4\vartheta^{14} \\
& -34381482610m^4\vartheta^{12} + 68155087874m^4\vartheta^{10} - 26889177832m^4\vartheta^8 \\
& -88989967474m^4\vartheta^6 + 23423347637m^4\vartheta^4 + 1503982008m^4\vartheta^2 \\
& -21023520m^4 - 27648m^3S\vartheta^{23} + 2560512m^3S\vartheta^{21} \\
& -75157248m^3S\vartheta^{19} + 878917024m^3S\vartheta^{17} - 4756268528m^3S\vartheta^{15} \\
& +15403929472m^3S\vartheta^{13} - 47866669328m^3S\vartheta^{11} + 143342421280m^3S\vartheta^9 \\
& -211432442384m^3S\vartheta^7 - 13048228160m^3S\vartheta^5 + 19376971792m^3S\vartheta^3 \\
& +138166528m^3S\vartheta + 6912m^3\vartheta^{23} - 920064m^3\vartheta^{21} + 43324752m^3\vartheta^{19} \\
& -862334032m^3\vartheta^{17} + 7188952028m^3\vartheta^{15} - 28619230072m^3\vartheta^{13} \\
& +74968583156m^3\vartheta^{11} - 128759050864m^3\vartheta^9 + 109262297924m^3\vartheta^7 \\
& -13583159608m^3\vartheta^5 - 3403352548m^3\vartheta^3 + 104186864m^3\vartheta \\
& +88128m^2S^2\vartheta^{18} - 5661216m^2S^2\vartheta^{16} + 126626868m^2S^2\vartheta^{14} \\
& -1389312792m^2S^2\vartheta^{12} + 7510080060m^2S^2\vartheta^{10} \\
& +6699246048m^2S^2\vartheta^8 - 81389562516m^2S^2\vartheta^6 \\
& +17546403528m^2S^2\vartheta^4 + 1890130788m^2S^2\vartheta^2 - 5952240m^2S^2 \\
& +12960m^2S\vartheta^{24} - 1261008m^2S\vartheta^{22} + 40801610m^2S\vartheta^{20} \\
& -573042400m^2S\vartheta^{18} + 4102705460m^2S\vartheta^{16} - 17949402388m^2S\vartheta^{14} \\
& +54147012536m^2S\vartheta^{12} - 88659075172m^2S\vartheta^{10} + 23705395772m^2S\vartheta^8 \\
& +104268297428m^2S\vartheta^6 - 29137897186m^2S\vartheta^4 - 933679788m^2S\vartheta^2 \\
& +8045520m^2S - 21600m^2\vartheta^{24} + 2130288m^2\vartheta^{22} - 70231862m^2\vartheta^{20} \\
& +993663064m^2\vartheta^{18} - 6588920822m^2\vartheta^{16} + 21273841768m^2\vartheta^{14} \\
& -36773524550m^2\vartheta^{12} + 29489043052m^2\vartheta^{10} + 2453319430m^2\vartheta^8 \\
& -16244540288m^2\vartheta^6 + 6066589804m^2\vartheta^4 - 616417884m^2\vartheta^2 \\
& +15069600m^2 + 8640mS^2\vartheta^{23} - 810528mS^2\vartheta^{21} + 24462492mS^2\vartheta^{19} \\
& -304803428mS^2\vartheta^{17} + 1895593540mS^2\vartheta^{15} - 7892201732mS^2\vartheta^{13}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+28573200892mS^2\vartheta^{11} - 80832632012mS^2\vartheta^9 + 112903601356mS^2\vartheta^7 \\
&+4059698836mS^2\vartheta^5 - 9320070248mS^2\vartheta^3 - 88134464mS^2\vartheta \\
&-13824mS\vartheta^{23} + 1504896mS\vartheta^{21} - 57458016mS\vartheta^{19} + 970816464mS\vartheta^{17} \\
&-7539800580mS\vartheta^{15} + 29280652776mS\vartheta^{13} - 69097935564mS\vartheta^{11} \\
&+95867473104mS\vartheta^9 - 61386308316mS\vartheta^7 + 11668622760mS\vartheta^5 \\
&+411516300mS\vartheta^3 - 119070000mS\vartheta + 7776m\vartheta^{23} - 816048m\vartheta^{21} \\
&+29591910m\vartheta^{19} - 470447208m\vartheta^{17} + 3408558228m\vartheta^{15} - 11520189432m\vartheta^{13} \\
&+20640260952m\vartheta^{11} - 20581215120m\vartheta^9 + 11291516892m\vartheta^7 - 3208252392m\vartheta^5 \\
&+432064242m\vartheta^3 - 21079800m\vartheta - 29376S^3\vartheta^{18} + 1887072S^3\vartheta^{16} \\
&-42208956S^3\vartheta^{14} + 463104264S^3\vartheta^{12} - 2503360020S^3\vartheta^{10} \\
&-2233082016S^3\vartheta^8 + 27129854172S^3\vartheta^6 - 5848801176S^3\vartheta^4 \\
&-630043596S^3\vartheta^2 + 1984080S^3 - 2160S^2\vartheta^{24} + 202776S^2\vartheta^{22} \\
&-6124711S^2\vartheta^{20} + 76174514S^2\vartheta^{18} - 465949444S^2\vartheta^{16} \\
&+1802874866S^2\vartheta^{14} - 4624492318S^2\vartheta^{12} + 2539597850S^2\vartheta^{10} \\
&+11388154628S^2\vartheta^8 - 15090009418S^2\vartheta^6 + 4737856805S^2\vartheta^4 \\
&-358560588S^2\vartheta^2 + 277200S^2 + 6480S\vartheta^{24} - 632520S\vartheta^{22} \\
&+20437893S\vartheta^{20} - 278113842S\vartheta^{18} + 1708216542S\vartheta^{16} - 4649322690S\vartheta^{14} \\
&+5545099872S\vartheta^{12} - 1068342822S\vartheta^{10} - 3854828142S\vartheta^8 + 3695411682S\vartheta^6 \\
&-1302877845S\vartheta^4 + 195000192S\vartheta^2 - 10054800S) \\
&1/(288(3\vartheta+1)(3\vartheta-1)(2\vartheta+1)^2(2\vartheta-1)^2(\vartheta+7)(\vartheta+5)(\vartheta+3) \\
&(\vartheta+2)^2(\vartheta+1)^5(\vartheta-1)^5(\vartheta-2)^2(\vartheta-3)(\vartheta-5)(\vartheta-7))
\end{aligned}
$$

4.4 Berechnung der Magnetisierung

Nun verwenden wir die Ergebnisse aus der Rechnung mit Magnetfeld um die Magnetisierung, d.h.den Erwartungswert von S_z, zu berechnen. [24] Für diesen gilt:

$$
m(\gamma) = \frac{1}{N}\frac{\partial E(m,\gamma,\vartheta)}{\partial\vartheta}\,|_{\vartheta=0} \tag{4.50}
$$

Wir bestimmen die Koeffizienten von $m(\gamma)$ in den einzelnen Potenzen von γ. Zunächst der Anfangswert $m(\gamma = 0)$:

$$
\begin{aligned}
m(\gamma = 0) &= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial\vartheta} < n \mid \tilde{H}_0 \mid n >|_{\vartheta=0} && (4.51) \\
&= \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\tilde{\varepsilon}_0 \,|_{\vartheta=0} && (4.52) \\
&= m && (4.53)
\end{aligned}
$$

Dabei ist $\tilde{\varepsilon}_0$ die ungestörte Grundzustandsenergie.

In zweiter Ordnung setzen wir in $E^{(2)}$ die Normierungsfaktoren $C_\pm = s(s+1) - m(m \pm 1)$ ein. Damit erhalten wir:

$$m(\gamma)^{(2)} = -\frac{1}{2}\gamma^2 \frac{\partial}{\partial\vartheta}\left\{\frac{s(s+1) - m^2 + \vartheta m}{1 - \vartheta^2}\right\}|_{\vartheta=0} \tag{4.54}$$

$$= -\frac{1}{2}\gamma^2 m \tag{4.55}$$

In vierter Ordnung müssen Beiträge von $E^{(3)}$ und $E^{(4)}$ berücksichtigt werden. Diese werden mit einem REDUCE-Programm Summiert und nach ϑ differenziert. Als Resultat erhalten wir:

$$\frac{m(\gamma)^{(4)}}{m(\gamma=0)} = \left\{\frac{17}{16}m^2 - \frac{17}{16}s(s+1) - \frac{11}{32}\right\}\gamma^4 \tag{4.56}$$

Dies stimmt mit der von D. Sen [24] erhaltenen Funktion überein.

In sechster Ordnung tragen Terme aus $E^{(3)}$, $E^{(4)}$, $E^{(5)}$, $E^{(6)}$ bei, die im vorhergehenden Abschnitt zu E_{ges} zusammengefaßt wurden. Differentiation nach ϑ und Normierung liefert:

$$\begin{aligned}\frac{m(\gamma)^{(6)}}{m(\gamma=0)} = & \left\{-\frac{781751}{793800}m^4 + \frac{539713}{198450}m^2 s(s+1) + \frac{6511679}{3175200}m^2\right. \\ & \left. -\frac{1377101}{793800}\left[s(s+1)\right]^2 - \frac{75}{32}s(s+1) - \frac{239}{576}\right\}\gamma^6\end{aligned} \tag{4.57}$$

Insgesamt erhält man also für die normierte Magnetisierung:

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{m(\gamma)}{m} = & 1 - \frac{1}{2}\gamma^2 + \left\{\frac{17}{16}m^2 - \frac{17}{16}s(s+1) - \frac{11}{32}\right\}\gamma^4 \\ & + \left\{-\frac{781751}{793800}m^4 + \frac{539713}{198450}m^2 s(s+1) + \frac{6511679}{3175200}m^2\right. \\ & \left. -\frac{1377101}{793800}\left[s(s+1)\right]^2 - \frac{75}{32}s(s+1) - \frac{239}{576}\right\}\gamma^6 \qquad (4.58)\end{aligned}}$$

In diese allgemeine Formel für die Magnetisierung setzen wir nun konkrete Werte für den Spin und die zugehörigen m-Quantenzahlen ein. Daraus ergeben sich die folgenden Funktionen und deren Nullstellen $\gamma*$:

$$mag(s=1/2, m=1/2) = -\frac{35}{16}\gamma^6 - \frac{7}{8}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.59}$$
$$\gamma* = 0.7596 \tag{4.60}$$

$$mag(s=1, m=1) = -\frac{1063}{192}\gamma^6 - \frac{45}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.61}$$
$$\gamma* = 0.668733 \tag{4.62}$$

$$mag(s=1, m=0) = -\frac{76469707}{6350400}\gamma^6 - \frac{79}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.63}$$
$$\gamma* = 0.592405 \tag{4.64}$$

$$mag(s=3/2, m=3/2) = -\frac{3175}{288}\gamma^6 - \frac{31}{16}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.65}$$
$$\gamma* = 0.607171 \tag{4.66}$$

$$mag(s=3/2, m=1/2) = -\frac{32386091}{1058400}\gamma^6 - \frac{65}{16}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.67}$$
$$\gamma* = 0.516137 \tag{4.68}$$

$$mag(s=2, m=2) = -\frac{3689}{192}\gamma^6 - \frac{79}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.69}$$
$$\gamma* = 0.560905 \tag{4.70}$$

$$mag(s=2, m=1) = -\frac{126049439}{2116800}\gamma^6 - \frac{181}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.71}$$
$$\gamma* = 0.467396 \tag{4.72}$$

$$mag(s=2, m=0) = -\frac{18094169}{235200}\gamma^6 - \frac{215}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.73}$$
$$\gamma* = 0.448626 \tag{4.74}$$

$$mag(s = 5/2, m = 5/2) = -\frac{92}{3}\gamma^6 - 3\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.75}$$
$$\gamma* = 0.52418 \tag{4.76}$$

$$mag(s = 5/2, m = 3/2) = -\frac{15967033}{158760}\gamma^6 - \frac{29}{4}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.77}$$
$$\gamma* = 0.43204 \tag{4.78}$$

$$mag(s = 5/2, m = 1/2) = -\frac{25991591}{176400}\gamma^6 - \frac{75}{8}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.79}$$
$$\gamma* = 0.406231 \tag{4.80}$$

$$mag(s = 3, m = 3) = -\frac{26465}{576}\gamma^6 - \frac{113}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.81}$$
$$\gamma* = 0.493994 \tag{4.82}$$

$$mag(s = 3, m = 2) = -\frac{65775457}{423360}\gamma^6 - \frac{283}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.83}$$
$$\gamma* = 0.404568 \tag{4.84}$$

$$mag(s = 3, m = 1) = -\frac{103576079}{423360}\gamma^6 - \frac{385}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.85}$$
$$\gamma* = 0.375823 \tag{4.86}$$

$$mag(s = 3, m = 0) = -\frac{21822967}{78400}\gamma^6 - \frac{419}{32}\gamma^4 - \frac{1}{2}\gamma^2 + 1 \tag{4.87}$$
$$\gamma* = 0.368058 \tag{4.88}$$

Diese normierten Magnetisierungsfunktionen sollen nun untersucht werden. Graphische Darstellungen finden sich im Anhang in den Figuren 2.1 bis 2.8. Man erkennt, daß sich die Magnetisierungen für verschiedene m-Quantenzahlen, bei jeweils festem Spin, unterscheiden. Für höhere Spins liegen die Magnetisierungskurven für die niedrigsten m-Werte sehr dicht beieinander, Funktionen mit maximalem m liegen weiter entfernt (siehe z.B. Fig. 2.5 mit $s = 3$).

Am kritischen Punkt sollte außerdem die Magnetisierung gegen Null gehen, daher liefern die Nullstellen der Magnetisierungsfunktionen Anhaltspunkte für die kritischen Parameter $\gamma*$. Die so erhaltenen Werte unterscheiden sich jedoch für verschiedene m-Quantenzahlen in allgemeinen beträchtlich. Vergleichsmöglichkeiten bieten finite-size-Rechnungen [13] [22], deren Ergebnisse in die Figuren 2.1 bis 2.4 eingetragen sind. Die Nullstellen der Magnetisierungen liegen stets bei höheren Werten für $|\gamma|$ als die numerischen Parameter. In den Figuren 2.6 bis 2.8 ist das Verhalten der Potenzreihen für verschiedene Ordnungen in γ gegenübergestellt. Der Vergleich zeigt, daß die Funktionen mit wachsender Ordnung enger werden, d.h. die Nulldurchgänge verschieben sich zu kleineren Werten von γ. Die Berücksichtigung der Terme mit γ^6 führt also zu einer genaueren Beschreibung des kritischen Verhaltens.
Zusätzlich ist es interessant, die unnormierten, d.h. die mit m multiplizierten Magnetisierungsfunktionen zu betrachten.(Siehe Fig. 3.1 bis 3.4.) Da $(2s+1)$-fache multikritische Punkte durch die Ununterscheidbarkeit von $(2s+1)$ Phasen definiert sind, sollten Schnittpunkte der Magnetisierungsfunktionen für festen Spin aber unterschiedliche m-Quantenzahlen die Lokalisierung dieser Koexistenzpunkte erlauben. Man erkennt jedoch, daß die störungstheoretische Behandlung des Spin s - Modells im allgemeinen keine Punkte mit maximaler Multikritizität $(2s+1)$ liefert. Speziell ergibt sich für Spin 1 aus den Schnittpunkten eine Abschätzung für $\gamma*$, die den Nullstellen des Zwieges mit $m = 1$ entspricht und die im Vergleich mit den FSS-Werten zu große Werte liefert. Für höhere Spins erhält man aus den Schnittpunkten ebenfalls kritische Werte, die (etwa um einen Faktor 2) größer sind als nach numerischen Rechnungen zu erwarten wäre. Es fällt weiterhin auf, daß die Zweige mit $m = s$ vom erwarteten Verhalten besonders stark abweichen.
Zur Ermittlung der kritischen Werte $\gamma*$ verwenden wir noch ein weiteres Verfahren: einem Vorschlag von D. Sen [24] folgend, soll die Potenzreihe für die Magnetisierung mit dem in der Nähe des kritischen Punktes zu erwartenden Verhalten der normierten Magnetisierungsfunktion $m(\gamma)$ verglichen werden. Diese Annahme lautet:

$$m(\gamma) = \Big(1 - \frac{\gamma^2}{\gamma*^2}\Big)^\beta \tag{4.89}$$

Wobei β der zur Magnetisierung gehörende kritische Exponent ist. Diese Funktion wird nun bis zur sechsten Ordnung in γ entwickelt und koeffizientenweise mit den in Störungsrechnung ermittelten Potenzreihen verglichen. Der quadratische Term liefert:

$$\beta = \frac{1}{2}\gamma*^2 \tag{4.90}$$

In vierter Ordnung erhält man:

$$\frac{1}{\gamma*^2} = \frac{17}{4}\Big[s(s+1) - m^2\Big] + \frac{15}{8} \tag{4.91}$$

Der Term in sechster Ordnung liefert eine Fehlerabschätzung für die in vierter Ordnung bestimmten kritischen Werte $\gamma*$. Dazu wird die Differenz der Koeffizienten von γ^6 am kritischen Punkt ausgerechnet . Bemerkenswert ist, daß dieser Fehler im Fall $s = 1/2$ gleich Null ist, d.h. für das Ising- Modell stimmt die störungstheoretisch ermittelte Magnetisierung exakt mit der Potenzreihenentwicklung des zu erwartenden kritischen Verhaltens überein. Die Ergebnisse dieser Überlegungen werden in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

Spin	m	$\gamma*$ in 4. Ordn. (Koeffizientenvgl.)	Fehler	$\beta = \frac{1}{2}\gamma*^2$	$\gamma*$ (numerisch)	$\gamma*$ (Nullstellen)
1/2	1/2	1/2	0	1/8		0.760
1	1	0.404	0.024	4/49	0.416	0.669
	0	0.310	0.011	4/83		0.592
3/2	3/2	0.348	0.020	2/33	0.366	0.607
	1/2	0.244	0.006	2/67		0.516
2	2	0.310	0.017	4/83	0.278	0.561
	1	0.208	0.005	4/185		0.467
	0	0.191	0.004	4/219		0.449
5/2	5/2	0.283	0.016	1/25	0.227	0.524
	3/2	0.184	0.004	1/59		0.432
	1/2	0.162	0.003	1/76		0.406
3	3	0.261	0.015	4/117		0.494
	2	0.167	0.003	4/287		0.404
	1	0.143	0.002	4/389		0.375
	0	0.138	0.002	4/423		0.368

Man erkennt, daß die durch Koeffizientenvergleich gewonnenen Werte für $\gamma*$ recht gut mit den FSS-Daten übereinstimmen. Die kritischen Parameter unterscheiden sich für verschiedene m-Quantenzahlen, wobei die Fehler durch Terme in höherer Ordnung für niedrige m-Werte kleiner werden. Eine Möglichkeit, die Bestimmung von kritischen Parametern noch zu verbessern, könnte die Verwendung von *Padé*- Approximanden [30], an Stelle des oben beschriebenen Koeffizientenvergleichs, bieten.

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die folgende SU(2)-Spinquantenkette

$$H_Q = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{1}{2}(S_{iz} - S_{i+1,z})^2 + \gamma S_{ix} + \sum_{n=1}^{[S]} a'_{2n} S_{iz}^{2n} \right] \tag{5.1}$$

mit störungstheoretischen Methoden untersucht, die einer Tieftemperaturentwicklung entsprechen. Ausgehend vom 0-Punkt im Raum der Parameter (γ, a'_{2n}) , erhält man eine Phasengrenze 1. Ordnung, die an einem multikritischen Punkt in eine Phasengrenze 2. Ordnung übergehen sollte. Die Forderung nach Aufrechterhaltung der Entartung des Grundzustandes auch für $\gamma \neq 0$ liefert Bedingungen an die Koeffizienten a'_{2n}, die man für jeden Spin s als Potenzreihe in γ erhält. Die so konstruierten Funktionen stimmen sehr gut mit denen aus finite-size-scaling erhaltenen Phasengrenzen [13] [22] überein.
Um die einzelnen Phasen durch Ordnungsparameter zu charakterisieren und deren Ununterscheidbarkeit an einem multikritischen Punkt zu überprüfen, wird das Modell an ein longitudinales Magnetfeld angekoppelt. Als Ordnungsparameter verwenden wir den Erwartungswert von S_z, der als Magnetisierung bezeichnet wird.
Zur Ermittlung von kritischen Werten $\gamma*$ wurden die Funktionen $m(\gamma)$ mit den Entwicklungen des für den Phasenübergang zu erwartenden Verhaltens $m(\gamma) = (1 - \frac{\gamma^2}{\gamma*^2})^\beta$ verglichen. Der Koeffizient in 6. Ordnung liefert dabei eine Fehlerabschätzung. Die so ermittelten Werte sind in guter Übereinstimmung mit dem durch FSS-Methoden gefundenen kritischen Werten [13] [22]. Aus den Nullstellen von $m(\gamma)$ erhaltene kritische Werte sind im allgemeinen zu groß und stimmen mit den FSS Vorhersagen nicht so gut überein.
An einem $(2s+1)$-fachen multikritischen Punkt sollte die Magnetisierung unabhängig von den m-Quantenzahlen, d.h. für alle Phasen gleich sein. Es zeigt sich jedoch, daß für das Spin s-Modell die Existenz $(2s+1)$-facher multikritischer Punkte nicht eindeutig festgestellt werden kann. Man kann aber erkennen, daß für Spin 5/2 und Spin 3 die Phasen mit den niedrigsten m-Werten dicht beieinander liegende Ordnungsparameter besitzen, so daß hier möglicherweise Punkte mit nicht-maximaler Multikritizität realisiert werden. Der Phasenübergang des klassischen Modells für $\gamma = 0$ ist von 1. Ordnung und es ist nicht klar, daß dieser stetig in einen Phasenübergang 2. Ordnung übergeht, so daß multikritische Punkte erreicht werden. Es bleibt die Frage offen, ob unter Mitberücksichtigung höherer Ordnungen in γ eine Entartung aller möglicher Phasen, d.h. die Überschneidung aller Zweige der Magnetisierungsfunktionen in einem Punkt, erreicht werden kann. Möglicherweise ist aber schon der Ansatz für H_Q mit nur einem Term für die nächste-Nachbar-Wechselwirkung zu speziell, um maximale Multikritizität zu realisieren, und man muß weitere Z_2-symmetrische Terme (wie zum Beispiel im Blume-Emery-Griffith-Modell) hinzunehmen.

6 Literatur

[1] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. **B241** (1984) 333

[2] P. Ginsparg , *Applied Conformal Field Theory,* Les Houches 1988, Session XLIX, North Holland

[3] J. L. Cardy, *Conformal Invariance and Statistical Mechanics,* Les Houches 1988, Session XLIX, North Holland

[4] A. B. Zamolodchikov, Theor. Math. Phys. **65** (1986) 1205

[5] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics,* Academic Press, London, 1982

[6] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51** (1979) 659

[7] D. Furman, S. Dattagupta, R. B. Griffiths, Phys. Rev. B **15** (1977) 441

[8] D. Mukamel, M. Blume, Phys. Rev. A **10** (1974) 610

[9] D. A. Huse, Phys. Rev. B **30** (1984) 3908

[10] G. E. Andrews, R. J. Baxter, P. J. Forrester, J. Stat. Phys. **35** (1984) 193

[11] D. Friedan, Z. Qiu, S. Shenker, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 1575

[12] A. A. Belavin, A. B. Zamolodchikov, A. M. Polyakov, J. Stat. Phys. **34**, (1984) 763

[13] G. v. Gehlen, Veröffentlichung in Vorbereitung

[14] M. Blume, V. J. Emery, R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **4** (1971) 1071

[15] S. Krinsky, D. Mukamel, Phys. Rev. B **11** (1975) 399

[16] H. Hamber, Phys. Rev. B **21** (1980) 3999

[17] Bambi Hu, Phys. Lett. **75A** (1980) 372

[18] D. Boyanovsky, L. Masperi, Phys. Rev. D **21** (1980) 1550

[19] Y. Gefen, Y. Imry, D. Mukamel, Phys. Rev. B **23** (1981) 6099

[20] F. C. Alcaraz, J. R. Drugowich de Felicio, R. Köberle, J. F. Stilck, Phys. Rev. B **32** (1985) 7469

[21] D. B. Balbao, J. R. Drugowich de Felicio, J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987) L207

[22] G. v. Gehlen, Nucl. Phys. **B330** (1990) 741

[23] A. L. Malvezzi, Braz. J. of Phys. **24** (1994) 508

[24] D. Sen, Phys. Rev. B **44** (1991) 2645

[25] P. Pfeuty, G. Toulouse *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena,* J. Wiley & Sons 1977

[26] I. D. Lawrie, S. Sarbach in *Phase Transitions and Critical Phenomena,* Bd. 9, Herausgeber: C. Domb, J. L. Lebowitz, Academic Press 1984

[27] A. Honecker, private Mitteilung

[28] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics,* The Benjamin / Cunnings Publishing Company 1969

[29] G. v. Gehlen, private Mitteilung

[30] D. S. Gaunt, A. J. Guttmann in *Phase Transitions and Critical Phenomena,* Bd. 3, Herausgeber: C. Domb, M. S. Green, Academic Press 1974

7 Anhang