
Approximation des Heisenberg-Hamilton-Operators in der Basis der spin-kohärenten Zustände

Diplomarbeit

Frank Hesmer
Fachbereich Physik



17. September 2003

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	3
1 Einleitung	5
2 Spin-kohärente Zustände	8
2.1 Herleitung und Definitionen	8
2.2 Eigenschaften	9
2.3 Erwartungswerte	12
3 Vielteilchen-System mit spin-kohärenten Zuständen	15
3.1 Kopplungsmatrix	15
3.2 Konventionen	19
3.3 Die Überlappmatrix	20
3.4 Der Heisenberg-Hamilton-Operator	21
3.5 Die Schrödinger-Gleichung	21
3.6 Der Gesamtspin	22
4 Exakte Diagonalisierung	24
4.1 Konstruktion von Produktzuständen aus spin-kohärenten Zuständen	24
4.1.1 Rotation von spin-kohärenten Zuständen auf einem Kreis .	24
4.2 Resultate	25
4.2.1 Spin-Dimer	25
4.2.2 Spontane Entartung	27
4.2.3 Weitere Beispiele	28
5 Approximative Diagonalisierung	31
5.1 Was wir aus dem klassischen Grundzustand lernen können	31
5.1.1 Erzeugen von Produktzuständen mit Zufallszahlen	32
5.2 Vektorbedingung für Produktzustände aus spin-kohärenten Zuständen	34
5.3 Untergitter und spin-kohärente Zustände	36
5.4 Der Rotationsband-Operator	39

5.4.1	Verallgemeinerung für gerade Ringe	39
5.4.2	Beispiel für ein 3-kolorierbares System: Das Ikosidodekaeder	41
5.4.3	Verallgemeinerung für 3-kolorierbare Systeme mit vier nächsten Nachbarn	43
6	Zusammenfassung und Ausblick	45
A	Anhang	46
A.1	Beweis des Vorfaktors	46
A.2	Spin-kohärente Zustände in der Winkeldarstellung	47
A.3	Gleichverteilte Zufallszahlen für Kugelkoordinaten	48
A.4	Kopplungsmatrix des Ikosidodekaeders	50
A.5	Erweiterung des Binomischen Satzes	50
A.6	Ritz'sches Variations-Prinzip:	51
A.7	Benötigter Arbeitsspeicher	51
A.8	LAPACK++ und zhegv	52
	Literatur	53

1 Einleitung

Die Entdeckung und das Synthetisieren von magnetischen Molekülen am Ende des letzten Jahrhunderts eröffnete der Physik ein neues Anwendungsgebiet. Insbesondere für die theoretische Physik gab es neue Herausforderungen, Konzepte zu finden, welche geeignet sind, diese Moleküle zu beschreiben.

Magnetische Moleküle sind Makro-Moleküle, sogenannte Polyoxo-Metallate. Sie setzen sich zusammen aus Elementen wie Wasserstoff, Sauerstoff und Kohlenstoff und enthalten paramagnetische Ionen wie Eisen, Kupfer oder Nickel. Diese paramagnetischen Ionen können in ihren Eigenschaften durch den Spin beschrieben werden. Da die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Molekülen sehr schwach ausgeprägt ist, kann man direkt auf die thermischen Eigenschaften der einzelnen Moleküle schließen. Es lassen sich Spin-Systeme mit bis zu 30 Spins herstellen und einem intrinsischen Spin s von $1/2$ bis $7/2$. Die einzelnen Spins können zum Beispiel auf einem 10er-Ring angeordnet werden (*ferric wheel*) oder bei komplizierteren Spin-Systemen liegen sie auf den Ecken eines Ikosidodekaeders $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$.

Ein Vorteil der magnetischen Moleküle ist die einfache Herstellung (mehr als 10^{17} identische Moleküle) und Messung der wichtigsten makroskopischen Größen, wie zum Beispiel der Magnetisierung oder der Suszeptibilität.

Eine besondere Eigenschaft von magnetischen Molekülen ist, dass die Spins der einzelnen Ionen sich zu einem Gesamtspin \vec{S} koppeln (*single molecule magnet*). Durch Anlegen eines Magnetfeldes oder durch das Einstrahlen von Licht ist es möglich den Gesamtspin \vec{S} zu manipulieren. Dies ist eine Grundlage für ein zukünftiges Anwendungsgebiet, wie zum Beispiel die Herstellung größerer magnetischer Speichermedien bis zu einer maximalen Speicherdichte von 40 Tbit pro Quadrat-Zoll. Der heutige Stand der Technik liegt bei einigen hundert Gbit pro Quadrat-Zoll.

Weitere mögliche Anwendungsgebiete liegen in der Nano-Technik (*light-induced nano switches*), der Herstellung von hochauflösenden Displays oder der Realisierung sogenannter Qubits (*quanten-bits*) für den Quanten-Computer [1].

Ein geeignetes Modell, um magnetische Moleküle zu beschreiben, ist durch den Heisenberg-Hamilton-Operator gegeben

$$\hat{H} = \sum_{k,l} J_{kl} \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l . \quad (1.1)$$

\vec{s}_k ist der Einzelspin-Operator an der k -ten Stelle, J_{kl} ist ein Element aus der Kopplungsmatrix \hat{J} , welche die Wechselwirkung der einzelnen Spins repräsentiert

und dem jeweiligen Spin-System angepasst werden muss.

Ausgangspunkt der Modellierung ist gewöhnlich die Produkt-Basis $|\vec{m}\rangle$ mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \tilde{s}_z(k) |m_1, m_2, \dots, m_N\rangle &= m_k |m_1, m_2, \dots, m_N\rangle \quad \text{und} \\ \tilde{\vec{s}}^2 |m_1, m_2, \dots, m_N\rangle &= s(s+1) |m_1, m_2, \dots, m_N\rangle, \end{aligned} \quad (1.2)$$

wobei m_k die magnetische Quantenzahl ist und s die Spin-Quantenzahl. Die Eigenzustände des $\tilde{s}_z(k)$ -Operators bezeichnen wir auch als Spin-Zustände.

Bei weiteren Ausführungen wird man feststellen, dass die Spin-Zustände zwar geeignet sind, große magnetische Moleküle zu beschreiben, aber die Dimension des Hilbertraums D ist gleich der Anzahl der Spin-Zustände und nimmt mit dem intrinsischen Spin s und der Spinanzahl N zu:

$$D = (2s + 1)^N. \quad (1.3)$$

Zum Beispiel ist die Dimension D des Hilbertraums, beim Ikosidodekaeder mit $s = 5/2$, proportional zu 10^{23} und liegt in der Größenordnung der Avogadro-Konstanten. Solche großen Spin-Systeme sind mit den heutigen Computern numerisch nicht lösbar.

Diese Diplomarbeit soll klären, ob es möglich ist, mit spin-kohärenten Zuständen ein geeignetes Verfahren zu finden, das in der Lage ist, den niedrig liegenden Teil des Energie-Spektrums (Energie über die Gesamtspin-Quantenzahl S) zu approximieren.

Wir werden sehen, dass man mit spin-kohärenten Zuständen einen quantenmechanischen Zustand parametrisieren kann, in dem die Richtung, in die der Erwartungswert des Spins zeigt, durch zwei Winkel genau bestimmt ist. Damit hat man die Möglichkeit, eine Brücke zu schlagen zwischen dem klassischen Spin und dem quantenmechanischen Spin.

Als Ausgangspunkt für die Approximation des quantenmechanischen Grundzustandes orientiert man sich am klassischen Grundzustand und sucht in der Umgebung von geschickt gewählten Produktzuständen nach dem quantenmechanischen Grundzustand.

In der Literatur kennt man spin-kohärente Zustände unter den Namen Bloch-Zustände oder Atomare-Zustände. Spin-kohärente Zustände werden erfolgreich bei vielen Anwendungen benutzt, zum Beispiel in der Thermodynamik oder Kernphysik [2].

In Abschnitt 2 beschäftigen wir uns mit den Eigenschaften von spin-kohärenten Zuständen. Es werden die für Spin-Systeme typischen Erwartungswerte $\langle \tilde{\vec{S}}^2 \rangle$

und $\langle \vec{S}_z \rangle$ berechnet.

Der Abschnitt 3 befasst sich mit der Beschreibung von Spin-Systemen durch spin-kohärente Zustände. Insbesondere wird hier auf die Kopplungsmatrizen, die Überlappmatrix, den Hamilton-Operator und den Gesamspin-Operator eingegangen.

Einen Überblick über exakt lösbare Systeme verschaffen wir uns im Abschnitt 4. Exakt lösbar bedeutet dabei, dass die Dimension klein genug ist, dass die Produktzustände den gesamten Hilbertraum aufspannen. Es wird ein Konstruktionsverfahren für Produktzustände vorgestellt, die den gesamten Hilbertraum aufspannen, gefolgt von ein paar Beispielen.

Der Abschnitt 5 beschäftigt sich mit verschiedenen Ansätzen und Problemen für mögliche Approximationsverfahren. Eine besondere Rolle spielt hier der Rotationsband-Operator im Zusammenhang mit spin-kohärenten Zuständen.

In dem Abschnitt 6 gibt es eine kurze Zusammenfassung. Danach werden verschiedene Ansätze diskutiert, welche uns dem Ziel einer Approximation von Spin-Systemen mit spin-kohärenten Zuständen noch näher bringen könnten.

Im Anhang befinden sich Erklärungen und Definitionen gefolgt von einer Liste mit den Referenzen über die in dieser Diplomarbeit verwendete Literatur.

2 Spin-kohärente Zustände

2.1 Herleitung und Definitionen

Die Eigenschaften und Anwendungen von spin-kohärenten Zuständen wurden 1971 von Radcliff [3] diskutiert.

Um spin-kohärente Zustände herzuleiten, betrachten wir zuerst die wichtigsten Einteilchen-Spin-Operatoren und Eigenwertgleichungen

- Eigenwertgleichung für den Operator \tilde{s}_z und \tilde{s}^2 (in Einheiten von \hbar)

$$\tilde{s}_z |s, m\rangle = m |s, m\rangle \quad (2.1)$$

$$\tilde{s}^2 |s, m\rangle = s(s+1) |s, m\rangle . \quad (2.2)$$

- Auf- und Absteige-Operator

$$\tilde{s}_\pm |s, m\rangle = \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle , \quad (2.3)$$

wobei der Auf- und Absteige-Operator definiert sind als

$$\tilde{s}_\pm = \tilde{s}_x \pm i \tilde{s}_y . \quad (2.4)$$

Die Zustände des \tilde{s}_z -Operators kann man vereinfachend schreiben als

$$|s, m\rangle = |s, s-p\rangle \equiv |p\rangle . \quad (2.5)$$

Im Folgenden lassen wir s weg, da wir nur Systeme mit konstantem Spin betrachten.

Somit kann man Gleichung (2.1) und Gleichung (2.3) umschreiben zu

$$\tilde{s}_z |p\rangle = (s-p) |p\rangle \quad (2.6)$$

und

$$\tilde{s}_\pm |p\rangle = \sqrt{s(s+1) - (s-p)(s-p \pm 1)} |p \mp 1\rangle , \quad (2.7)$$

wobei gilt $\tilde{s}_+ |0\rangle = 0$, $\tilde{s}_- |2s\rangle = 0$ und $0 \leq p \leq 2s$.

Die Zustände $|p\rangle$ sind normiert und orthogonal:

$$\langle p' | p \rangle = \delta_{p'p} .$$

Analog zu den kohärenten Zuständen ([2], [4]) wendet man den Absteige-Operator \tilde{s}_- auf den höchsten Spin-Zustand $|0\rangle$ an und erzeugt so alle weiteren Spin-Zustände. Der Operator \tilde{s}_- p -mal angewendet auf $|0\rangle$ ergibt den Spin-Zustand $|p\rangle$

$$\tilde{s}_-^p |0\rangle = \left(\frac{p! (2s)!}{(2s-p)!} \right)^{1/2} |p\rangle . \quad (2.8)$$

Den Vorfaktor von $|p\rangle$ kann man mit vollständiger Induktion beweisen (siehe Anhang A.1).

Um die weiteren Schritte anschaulich darzustellen, erweitern wir Gleichung (2.8) mit $(1/p!)$, wir erhalten dann

$$\frac{s_-^p}{p!} |0\rangle = \binom{2s}{p}^{1/2} |p\rangle . \quad (2.9)$$

Allgemein sind spin-kohärente Zustände definiert als Zustände $|z\rangle$ mit

$$|z\rangle = \sqrt{N} e^{z s_-} |0\rangle \quad (2.10)$$

$$= \sqrt{N} \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p}^{1/2} z^p |p\rangle . \quad (2.11)$$

z ist eine Gewichtung und besteht aus einem Tupel mit zwei Zahlen (zum Beispiel $z \in \mathbb{C}$) und hängt ab von der Darstellung der spin-kohärenten Zustände. N ist ein Normierungsfaktor. Die p -fache Anwendung des Absteige-Operators steckt in der Potenzreihenentwicklung der e -Funktion.

Die Normierung ergibt sich nach folgender Rechnung unter Verwendung des Binomischen Satzes

$$\langle z | z \rangle = 1 = N \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p} (|z|^2)^p = N(1 + |z|^2)^{2s} \quad (2.12)$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{N} = \frac{1}{(1 + |z|^2)^s} . \quad (2.13)$$

Abschließend kann man normierte spin-kohärente Zustände schreiben als

$$|z\rangle = \frac{1}{(1 + |z|^2)^s} \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p}^{1/2} z^p |p\rangle . \quad (2.14)$$

Im Unterschied zu den kohärenten Zuständen ist die Summe wegen des Binomial-Koeffizienten endlich.

2.2 Eigenschaften

Wie wir in Abschnitt (2.1) gesehen haben, sind spin-kohärente Zustände normierbar. Bemerkenswert ist, dass sie nicht orthogonal sind, das heißt sie bilden einen

endlichen Überlapp

$$\begin{aligned}
\langle y | z \rangle &= \sum_{p'=0}^{2s} \sum_{p=0}^{2s} \frac{1}{(1+|y|^2)^s} \frac{1}{(1+|z|^2)^s} \binom{2s}{p'}^{1/2} \binom{2s}{p}^{1/2} (y^*)^{p'} z^p \underbrace{\langle p' | p \rangle}_{=\delta_{p'p}} \\
&= \frac{1}{(1+|y|^2)^s} \frac{1}{(1+|z|^2)^s} \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p} (y^* z)^p \\
&= \frac{(1+y^* z)^{2s}}{(1+|y|^2)^s (1+|z|^2)^s} .
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Laut Radcliff [3] erfüllen spin-kohärente Zustände die Vollständigkeits-Relation

$$\mathbb{1} = \sum_{p=0}^{2s} |p\rangle \langle p| = \frac{2s+1}{\pi} \int d^2z \frac{|z\rangle \langle z|}{(1+|z|^2)^2} , \tag{2.16}$$

wobei sich das Integral über die komplexe Ebene erstreckt.

Man kann auch das Skalarprodukt mit einem Eigenzustand von s_z bilden

$$\langle p | z \rangle = \frac{1}{1+|z|^2} \binom{2s}{p} z^p . \tag{2.17}$$

Mit Hilfe von Gleichung (2.16) und (2.17) kann man jeden Eigenzustand des s_z -Operators mittels spin-kohärenter Zustände darstellen

$$\begin{aligned}
|p\rangle &= \mathbb{1} |p\rangle = \frac{2s+1}{\pi} \int d^2z \frac{|z\rangle}{(1+|z|^2)^2} \underbrace{\langle z | p \rangle}_{=\langle p | z \rangle^*} \\
&= \frac{2s+1}{\pi} \binom{2s}{p}^{1/2} \int d^2z \frac{z^{*p}}{(1+|z|^2)^{2s}} |z\rangle .
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Als mögliche Darstellung von z kann man z als komplexe Zahl μ in der Gaußschen Zahlenebene betrachten oder mit Hilfe einer stereographischen Projektion als Punkt auf einer Kugel. Dazu setzt man die Kugel, welche einen Durchmesser von 1 hat, auf die Zahlenebene. Diese stereographische Projektion nennt man Riemannsche Zahlenkugel. Sie ermöglicht es, die komplexe Zahl μ durch die Winkel θ , ϕ oder $\Omega = (\theta, \phi)$ zu beschreiben.

Stellen wir uns eine Achse durch die beiden Pole der Kugel vor, die ebenfalls senkrecht durch die komplexe Zahlenebene geht. Kugel und Ebene müssen einen gemeinsamen Berührungspunkt haben. In der Literatur ist der Berührungspunkt entweder der Nordpol ($\theta = 0$) oder der Südpol ($\theta = \pi$), siehe [5] und [6].

Wir entscheiden uns für den Nordpol als Berührungspunkt mit dem Ursprung der Zahlenebene ($\mu = 0$) wie in Abbildung 1 gezeigt.

Ein Punkt aus der komplexen Zahlenebene μ kann so auf einen Punkt Ω projiziert werden. Die Projektion funktioniert wie folgt: Ein Strahl, der durch den Punkt μ in der komplexen Ebene geht, trifft auf die Kugeloberfläche im Punkt Ω und schneidet die Kugel ein weiteres Mal im Südpol. Diese Anordnung ist umkehrbar eindeutig [6], wenn für $\mu = \infty$, der Horizont der komplexen Ebene, der Südpol ($\theta = \pi$) als einziger Punkt ausgeschlossen wird.

Die beiden Winkel werden somit eingegrenzt auf

$$0 \leq \theta < \pi \quad \text{und} \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad . \quad (2.19)$$

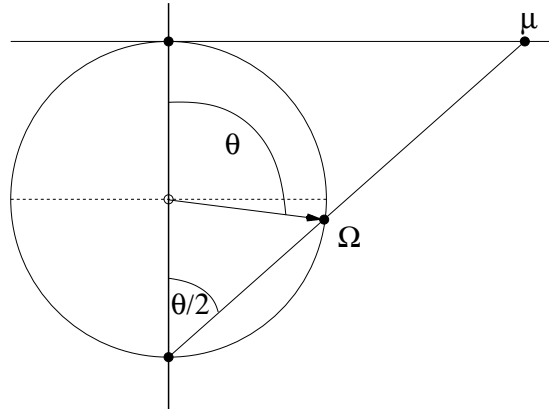


Abbildung 1: Blick auf die Riemannsche Zahlenkugel, wobei die komplexe Ebene horizontal und parallel zum Äquator verläuft. Um die Darstellung nicht weiter zu beeinträchtigen, wurde auf die Darstellung des Azimutwinkels ϕ verzichtet.

Um zwischen der Kugel und der komplexen Ebene transformieren zu können, findet man folgenden Zusammenhang

$$\mu = \tan(\theta/2) e^{i\phi} \quad . \quad (2.20)$$

Eine weitere wichtige Eigenschaft ist, dass spin-kohärente Zustände eine übervollständige Basis bilden. Damit ist gemeint, dass man unendlich viele spin-kohärente Zustände hat, aber die Dimension des Hilbertraums der von uns betrachteten Spin-Systeme immer endlich ist.

2.3 Erwartungswerte

Beginnen wir mit den Erwartungswerten der Auf- und Absteige-Operatoren. Damit lassen sich dann alle wesentlichen Erwartungswerte herleiten, wegen Gleichung (2.4) gilt

$$\tilde{s}_x = \frac{1}{2} (\tilde{s}_+ + \tilde{s}_-) \quad \text{und} \quad \tilde{s}_y = \frac{1}{2i} (\tilde{s}_+ - \tilde{s}_-) . \quad (2.21)$$

Wendet man den Auf- beziehungsweise Absteige-Operatoren auf $|z\rangle$ an, erhält man

$$\begin{aligned} \tilde{s}_\pm |z\rangle &= \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p}^{1/2} \frac{z^p}{(1+|z|^2)^2} \\ &\times \sqrt{s(s+1) - (s-p)(s-p\pm 1)} |p\mp 1\rangle . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Multipliziert mit dem spin-kohärenten Zustand $\langle y|$, ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle y | \tilde{s}_\pm |z\rangle &= \sum_{p'=0}^{2s} \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p'}^{1/2} \binom{2s}{p}^{1/2} \frac{(y^*)^{p'} z^p \delta_{p'p\mp 1}}{(1+|y|^2)^2 (1+|z|^2)^2} \\ &\times \sqrt{s(s+1) - (s-p)(s-p\pm 1)} \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p\mp 1}^{1/2} \binom{2s}{p}^{1/2} \frac{(y^*)^{p\mp 1} z^p}{(1+|y|^2)^2 (1+|z|^2)^2} \\ &\times \sqrt{s(s+1) - (s-p)(s-p\pm 1)} . \end{aligned} \quad (2.24)$$

Für das Produkt von zwei Binomial-Koeffizienten nutzen wir folgende Beziehungen

$$\binom{2s}{p-1} \binom{2s}{p} = \binom{2s}{p}^2 \frac{p}{2s-p+1} \quad (2.25)$$

und

$$\binom{2s}{p+1} \binom{2s}{p} = \binom{2s}{p}^2 \frac{2s-p}{p+1} . \quad (2.26)$$

Wir haben auch spezielle Summen, die eine Erweiterung des Binomischen Satzes erfordern:

$$\sum_{p=1}^{2s} \binom{2s}{p} p a^p = 2 s a (1+a)^{2s-1} \quad (2.27)$$

und

$$\sum_{p=0}^{2s-1} \binom{2s}{p} (2s-p) a^p = 2 s (1+a)^{2s-1} . \quad (2.28)$$

Die Herleitung von Gleichung (2.27) und Gleichung (2.28) befindet sich im Anhang A.5.

Setzt man die Gleichungen (2.25) bis (2.28) in Gleichung (2.23) ein, erhält man für den Erwartungswert des Auf- beziehungsweise Absteige-Operators

$$\langle y | \tilde{s}_+ | z \rangle = \frac{2 s z}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle \quad (2.29)$$

$$\langle y | \tilde{s}_- | z \rangle = \frac{2 s y^*}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle . \quad (2.30)$$

Um den Erwartungswert des Vektor-Operators \vec{s} zu berechnen, brauchen wir noch den Erwartungswert von \tilde{s}_z . Dazu nutzt man Gleichung (2.1) und multipliziert sie mit $\langle y |$:

$$\begin{aligned} \langle y | \tilde{s}_z | z \rangle &= \frac{1}{(1 + |y|^2)^s} \frac{1}{(1 + |z|^2)^s} \underbrace{\sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p} (s-p) (y^* z)^p}_{= s(1-y^*z)(1+y^*z)^{2s-1}} \\ &= s \frac{1 - y^* z}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle . \end{aligned}$$

Hier folgt eine Übersicht über die Erwartungswerte in der komplexen Darstellung. Die Erwartungswerte für die Winkeldarstellung befinden sich im Anhang (A.2).

$$\langle y | \tilde{s}_x | z \rangle = s \frac{y^* + z}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle \quad (2.31)$$

$$\langle y | \tilde{s}_y | z \rangle = i s \frac{y^* - z}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle \quad (2.32)$$

$$\langle y | \tilde{s}_z | z \rangle = s \frac{1 - y^* z}{1 + y^* z} \langle y | z \rangle . \quad (2.33)$$

Für den Vektor-Operator \vec{s} gilt

$$\langle y | \vec{s} | z \rangle = \frac{s \langle y | z \rangle}{1 + y^* z} \begin{pmatrix} y^* + z \\ i(y^* - z) \\ 1 - y^* z \end{pmatrix} . \quad (2.34)$$

Als Vereinfachung bietet sich an

$$\vec{e}_{yz} = \frac{1}{1 + y^* z} \begin{pmatrix} y^* + z \\ i(y^* - z) \\ 1 - y^* z \end{pmatrix} \quad \text{mit } |\vec{e}_{yz}| = 1 . \quad (2.35)$$

Damit reduziert sich der Erwartungswert des Vektor-Operators zu

$$\langle y | \vec{s} | z \rangle = s \langle y | z \rangle \vec{e}_{yz} . \quad (2.36)$$

Wir haben eine Relation gefunden, welche das Rechnen mit dem Heisenberg-Hamilton-Operator sehr vereinfacht.

Man kann Gleichung (2.36) umformen, falls für den Überlapp gilt

$$\langle y | z \rangle \neq 0 ,$$

erhält man

$$s \vec{e}_{yz} = \frac{\langle y | \vec{s} | z \rangle}{\langle y | z \rangle} . \quad (2.37)$$

Für das Skalarprodukt gilt

$$\vec{e}_{vw} \cdot \vec{e}_{yz} = \frac{1 + v^*(2z - w) + y^*(2w - z) + v^*w y^*z}{(1 + v^*w)(1 + y^*z)} . \quad (2.38)$$

3 Vielteilchen-System mit spin-kohärenten Zuständen

3.1 Kopplungsmatrix

Spin-Systeme repräsentieren eine bestimmte Anordnung einer endlichen Anzahl N von Spins s_i , die untereinander wechselwirken können. Diese Wechselwirkung wird mit der $N \times N$ -Kopplungsmatrix \hat{J} beschrieben.

\hat{J} hat zwei wesentliche Eigenschaften: Erstens sind auf der Hauptdiagonale nur Nullen ($\text{Sp}(\hat{J}) = 0$), weil die Spins nicht mit sich selbst wechselwirken können. Zweitens ist die Matrix symmetrisch ($J_{ij} = J_{ji}$). Besteht zwischen zwei Spins s_i und s_j eine Wechselwirkung, so soll für das Matrixelement $J_{ij} = J_{ji} = 1$ gelten.

Die Kopplungs-Matrix wird durch eine beliebige Nummerierung der Spins gebildet, das heißt zu jedem Spin-System gibt es mehrere äquivalente Kopplungsmatrizen. Unter der Voraussetzung, dass es eine zweidimensionale Projektion des Spin-Systems gibt, hat sich folgendes Prinzip für komplizierte Kopplungsmatrizen bewährt:

Man betrachte eine zweidimensionale Projektion des Körpers. Die Nummerierung erfolgt im Uhrzeigersinn von innen nach außen.

Als Beispiel betrachten wir den Kuboktaeder, er ist ein Abbildung 4 dargestellt. Abbildung 3 ist die zweidimensionale Projektion des Kuboktaeders.

In dieser Diplomarbeit betrachten wir folgende Spin-Systeme: N-Ringe, Tetraeder, Oktaeder, Kuboktaeder und Ikosidodekaeder.

N-Ringe bilden die einfachsten Kopplungsmatrizen, da der Spin s_i nur mit seinen unmittelbar nächsten Nachbarn (s_{i-1}, s_{i+1}) wechselwirken kann, (siehe Abbildung 2.a als Beispiel für $N = 6$). Ringe bilden ein regelmäßiges N -Eck, das heißt die Ecken liegen gleichmäßig auf einem Kreis. Die Matrix sieht wie folgt aus

$$\hat{J}_{\text{N-Ring}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & . & . & . & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & & & 0 \\ . & 1 & 0 & 1 & & & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & 1 & 0 & 1 & . \\ 0 & . & . & . & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & . & . & . & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Diese einfache Struktur der Kopplungsmatrix vereinfacht den Hamilton-Operator erheblich

$$\hat{H} = \vec{s}_{N-1} \cdot \vec{s}_0 + \sum_{m=0}^{N-2} \vec{s}_m \cdot \vec{s}_{m+1} \quad (3.1)$$

Das **Tetraeder** ist ein regulärer¹ Polyeder, auch platonischer Körper genannt. Es setzt sich aus 4 gleichseitigen Dreiecken zusammen (siehe Abbildung 2.b). In dieser Anordnung wechselwirken alle 4 Spins untereinander. Die Kopplungsmatrix ist bis auf die Hauptdiagonale besetzt

$$\hat{J}_{\text{Tetraeder}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Das **Oktaeder** ist ebenfalls ein platonischer Körper und besteht aus 8 gleichseitigen Dreiecken, (vergleiche Abbildung 2.c). Auf dem Oktaeder können 6 Spins wechselwirken. Die Kopplungsmatrix hat folgendes Aussehen

$$\hat{J}_{\text{Oktaeder}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

¹*Definition:* Ein Polyeder heißt regulär, wenn alle seine Oberflächen aus demselben regelmäßigen Vieleck bestehen und in jeder Ecke gleich viele dieser Vielecke zusammenstoßen, siehe: <http://mathworld.wolfram.com/PlatonicSolid.html>. Insgesamt gibt es 5 platonische Körper: Tetraeder, Hexaeder, Oktaeder, Dodekaeder und Ikosaeder.

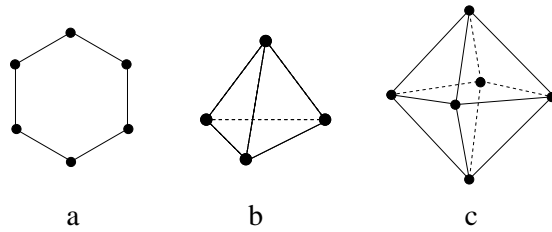


Abbildung 2: Spin-Systeme mit einfacher Kopplungsmatrix: a) 6er-Ring, b) Tetraeder, c) Oktaeder.

Das **Kuboktaeder** hat 12 Ecken, die aus 6 Quadraten und 8 gleichschenkligen Dreiecken besteht (vergleiche dazu Abbildung 3), da er kein regulärer Polyeder ist, sondern ein halbbregulärer², zählt er zu den archimedischen Körpern. Die Kopplungsmatrix ist nicht mehr trivial, und die Nummerierung wurde nach dem oben erwähnten Prinzip gewählt (siehe Abbildung 4)

$$\hat{J}_{\text{Kuboktaeder}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

²*Definition:* Ein Polyeder heißt halbbregulär oder semiregulär, wenn alle seine Oberflächen aus regelmäßigen Vielecken (eventuell unterschiedlicher Eckenzahl) bestehen, und jede Ecke des Polyeders durch eine seiner Symmetrieoperationen auf jede andere Ecke abgebildet werden kann. Vergleiche hierzu auch: <http://mathworld.wolfram.com/ArchimedeanSolid.html>

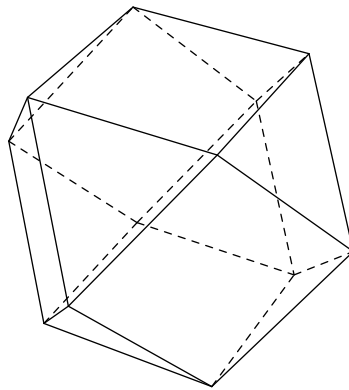


Abbildung 3: Dreidimensionale Ansicht des Kuboktaeders.

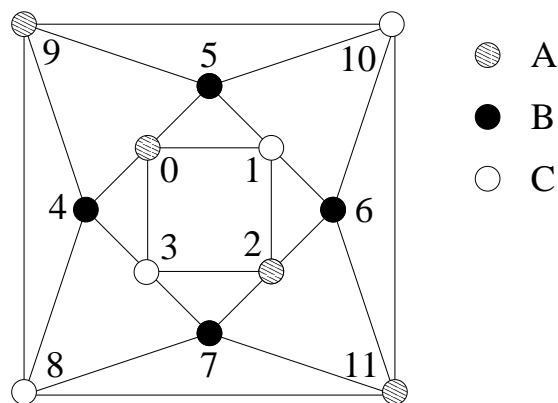


Abbildung 4: Zweidimensionale Projektion des Kuboktaeders ($N = 12$) mit den drei Untergittern A, B und C.

Das Ikosidodekaeder besteht aus 30 Spins und 20 gleichseitigen Dreiecken und 12 regulären Fünfecken, siehe Abbildung 5. Es gehört auch zu den archimedischen Körpern. Die Kopplungsmatrix, die nun 900 Elemente enthält, ist im Anhang (A.4) zu finden. Auch hier ist die Kopplungsmatrix nach dem oben genannten Prinzip gewählt worden, vergleiche Abbildung 6.

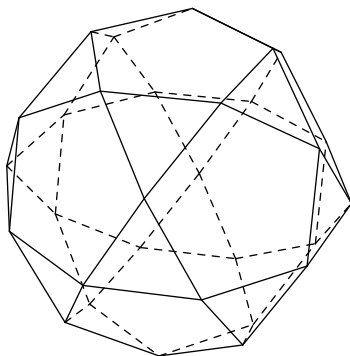


Abbildung 5: Dreidimensionale Ansicht des Ikosidodekaeders.

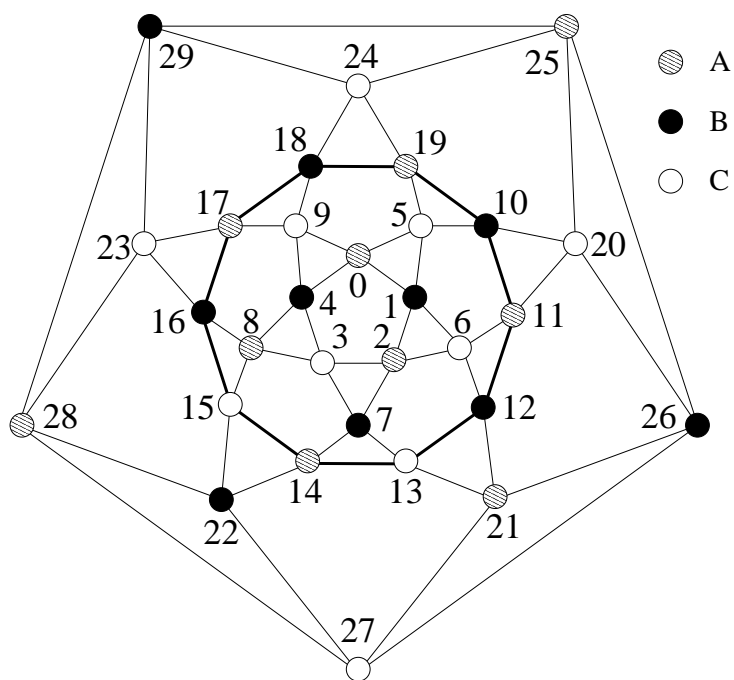


Abbildung 6: Zweidimensionale Projektion des Ikosidodekaeders ($N = 30$) mit den drei Untergittern A, B und C.

3.2 Konventionen

Im Abschnitt 2 haben wir uns mit spin-kohärenten Zuständen beschäftigt. In den folgenden Abschnitten werden wir auch Produktzustände aus spin-kohärenten

Zuständen betrachten. Es ist daher sinnvoll, für die folgenden Berechnungen einige Konventionen zu vereinbaren.

Die Notation in der komplexen Darstellung für spin-kohärente Zustände soll ab jetzt $|\mu\rangle$ oder $|\nu\rangle$ sein. Für die Winkeldarstellung gilt ab jetzt: $|\Omega\rangle = |\theta\phi\rangle$. Für Produktzustände von N spin-kohärenten Zuständen schreiben wir für die komplexe Darstellung

$$|\mu_0\rangle \otimes |\mu_1\rangle \otimes \dots \otimes |\mu_{N-1}\rangle = |\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{N-1}\rangle \equiv |\vec{\mu}\rangle ,$$

für die Winkeldarstellung

$$\begin{aligned} & |\theta_0\phi_0\rangle \otimes |\theta_1\phi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\theta_{N-1}\phi_{N-1}\rangle \\ &= |\theta_0\phi_0, \theta_1\phi_1, \dots, \theta_{N-1}\phi_{N-1}\rangle \equiv |\vec{\Omega}\rangle . \end{aligned}$$

Beim Programmieren hat es sich bewährt, Produktzustände in der Winkeldarstellung zu formulieren und erst vor dem Lösen der Eigenwertgleichung die Winkel in die komplexe Darstellung umzurechnen. Daher werden die meisten Berechnungen in der komplexen Darstellung ausgeführt.

Für die Dimension des ganzen Hilbertraums steht D . Betrachten wir nur einen Teil-Hilbertraum, so nennen wir die Dimension d .

Die Indizes werden nicht von 1 an hochgezählt, sondern, wie es in der verwendeten Programmiersprache üblich ist, von 0. Das hat den Vorteil, dass Formeln besser mit dem Quellcode verglichen werden können.

Die von mir benutzten LAPACK³-Routinen (siehe Anhang A.8) geben die Eigenwerte sortiert wieder, das bedeutet der kleinste Eigenwert ist immer E_0 , der größte ist E_{D-1} oder E_{d-1} .

Die Summations-Indizes i und j gehen von 0 bis $D-1$, (beziehungsweise $d-1$) und werden für die Summierung über die Produktzustände benutzt. Die Indizes k, l und m beschreiben die Summe über alle Spins und gehen von 0 bis $N-1$. Für alle anderen Indizes werden die Schranken angegeben.

Das Summenzeichen \sum' ist eine vereinfachte Schreibweise für $\sum'_{l,m} = \sum_{\substack{l,m=0 \\ l \neq m}}^{N-1}$.

3.3 Die Überlappmatrix

Da spin-kohärente Zustände einen Überlapp bilden, bilden auch die Produktzustände einen Überlapp. Seien

$$\begin{aligned} |\vec{\mu}_i\rangle &= |\mu_0^i, \mu_1^i, \dots, \mu_{N-1}^i\rangle \\ |\vec{\mu}_j\rangle &= |\mu_0^j, \mu_1^j, \dots, \mu_{N-1}^j\rangle , \end{aligned}$$

³Linear Algebra PACKage, siehe <http://www.netlib.org/lapack/>

zwei beliebige Produktzustände, so gilt für das Element der Überlappmatrix

$$O_{ij} = \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle = \begin{cases} \prod_{\alpha=0}^{N-1} \langle \mu_{\alpha}^i | \mu_{\alpha}^j \rangle & \text{falls } i \neq j \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.3)$$

3.4 Der Heisenberg-Hamilton-Operator

Die Matrixelemente des Heisenberg-Hamilton-Operators lauten

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \vec{\mu}_i | \underline{H} | \vec{\mu}_j \rangle \\ &= \langle \mu_0^i \mu_1^i \cdots \mu_{N-1}^i | \sum_{k,l} J_{kl} \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l | \mu_0^j \mu_1^j \cdots \mu_{N-1}^j \rangle \\ &= \sum_{k,l} J_{kl} \langle \mu_k^i | \vec{s}_k | \mu_k^j \rangle \cdot \langle \mu_l^i | \vec{s}_l | \mu_l^j \rangle \frac{\prod_{\alpha=0}^{N-1} \langle \mu_{\alpha}^i | \mu_{\alpha}^j \rangle}{\langle \mu_k^i | \mu_k^j \rangle \langle \mu_l^i | \mu_l^j \rangle} \\ &= \sum_{k,l} J_{kl} \underbrace{\frac{\langle \mu_k^i | \vec{s}_k | \mu_k^j \rangle}{\langle \mu_k^i | \mu_k^j \rangle}}_{= s \vec{e}_{\mu_k^i \mu_k^j}} \cdot \underbrace{\frac{\langle \mu_l^i | \vec{s}_l | \mu_l^j \rangle}{\langle \mu_l^i | \mu_l^j \rangle}}_{= s \vec{e}_{\mu_l^i \mu_l^j}} \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \\ &= s^2 \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \sum_{k,l} J_{kl} \vec{e}_{\mu_k^i \mu_k^j} \cdot \vec{e}_{\mu_l^i \mu_l^j} . \end{aligned} \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.4) wurde Gleichung (2.37) eingesetzt.

3.5 Die Schrödinger-Gleichung

Da spin-kohärente Zustände nicht orthogonal sind, bedarf es einer modifizierten Schrödinger-Gleichung, vergleiche [7].

Es folgt eine Herleitung der Schrödinger-Gleichung für nicht-orthogonale Basen:

Der Zustand $|\psi_{\nu}\rangle$ ist ein Eigenzustand des Hamilton-Operators \underline{H} . Der dazugehörige Eigenwert ist E_{ν} .

$$\begin{aligned} \underline{H} | \psi_{\nu} \rangle &= E_{\nu} | \psi_{\nu} \rangle \\ \Leftrightarrow \underline{H} \sum_j c_j^{\nu} | \vec{\mu}_j \rangle &= E_{\nu} \sum_j c_j^{\nu} | \vec{\mu}_j \rangle \\ \Leftrightarrow \sum_j c_j^{\nu} \langle \vec{\mu}_i | \underline{H} | \vec{\mu}_j \rangle &= \sum_j c_j^{\nu} E_{\nu} \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \\ \Leftrightarrow \sum_j c_j^{\nu} H_{ij} &= \sum_j c_j^{\nu} E_{\nu} \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle . \end{aligned}$$

Aus einer letzten Umformung erhält man

$$\sum_j c_j^\nu [H_{ij} - E_\nu \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle] = 0 . \quad (3.5)$$

Setzt man Gleichung (3.4) in Gleichung (3.5) ein, erhält man

$$s^2 \sum_j c_j^\nu \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \sum_{k,l} \left(J_{kl} \vec{e}_{\mu_k^i \mu_k^j} \cdot \vec{e}_{\mu_l^i \mu_l^j} - \frac{E_\nu}{s^2} \right) = 0 .$$

3.6 Der Gesamtspin

Im Folgenden wollen wir den Erwartungswert von $\vec{\tilde{S}}^2$ berechnen. Das Quadrat des Gesamtspin-Operators kann man umformen zu

$$\vec{\tilde{S}}^2 = \left(\sum_{k=0}^{N-1} \vec{\tilde{S}}_k \right)^2 = \sum_{k=0}^{N-1} \vec{\tilde{S}}_k^2 + \sum_{\substack{l,m=0 \\ l \neq m}}^{N-1} \vec{\tilde{S}}_l \cdot \vec{\tilde{S}}_m . \quad (3.6)$$

Somit erhält man für den Erwartungswert

$$\langle \psi_\nu | \vec{\tilde{S}}^2 | \psi_\nu \rangle = Ns(s+1) + \langle \psi_\nu | \sum_{l,m} \vec{\tilde{S}}_l \cdot \vec{\tilde{S}}_m | \psi_\nu \rangle . \quad (3.7)$$

Die Eigenzustände sind mit der Überlappmatrix \hat{O} in der Matrix-Darstellung [8] normiert

$$\langle \psi_\nu | \hat{O} | \psi_\nu \rangle = 1 , \quad (3.8)$$

vergleiche Abschnitt A.8.

Für die Norm kann man einsetzen

$$\langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle = |\psi_\nu|^2 = \sum_{i,j} c_i^{\nu*} c_j^\nu \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle . \quad (3.9)$$

Ist die Überlappmatrix gleich der Einheitsmatrix \hat{E} , sind die Eigenvektoren normiert und orthogonal

$$\langle \psi_\mu | \hat{E} | \psi_\nu \rangle = \langle \psi_\mu | \psi_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu} . \quad (3.10)$$

Durch Einsetzen der Eigenvektoren kann man den normierten Erwartungswert

$\langle \vec{S}^2 \rangle_\nu$ berechnen

$$\begin{aligned}
\langle \vec{S}^2 \rangle_\nu &= \frac{\langle \psi_\nu | \vec{S}^2 | \psi_\nu \rangle}{\langle \psi_\nu | \psi_\nu \rangle} \\
&= \frac{1}{|\psi_\nu|^2} \left(N s(s+1) + \langle \psi_\nu | \sum'_{k,l} \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l | \psi_\nu \rangle \right) \\
&= \frac{1}{|\psi_\nu|^2} \left(N s(s+1) + \sum_{i,j} c_i^{\nu*} c_j^\nu \sum'_{k,l} \langle \vec{\mu}_i | \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l | \vec{\mu}_j \rangle \right) \\
&= \frac{1}{|\psi_\nu|^2} \left(N s(s+1) + s^2 \sum_{i,j} c_i^{\nu*} c_j^\nu \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \sum'_{k,l} \vec{e}_{\mu_k^i \mu_k^j} \cdot \vec{e}_{\mu_l^i \mu_l^j} \right) .
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Ist $|\psi_\nu\rangle$ auch ein Eigenzustand von \vec{S}^2 , so erhalten wir $S_\nu(S_\nu + 1)$. Ist S_ν keine gute Quantenzahl, setzen wir

$$\langle \vec{S}^2 \rangle_\nu \equiv S_\nu(S_\nu + 1) , \tag{3.12}$$

auch wenn $|\psi_\nu\rangle$ kein Eigenzustand von \vec{S}^2 ist.

4 Exakte Diagonalisierung

4.1 Konstruktion von Produktzuständen aus spin-kohärenten Zuständen

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit dem Erzeugen von Produktzuständen aus spin-kohärenten Zuständen. Die Anzahl der Produktzustände entspricht der Dimension des ganzen Hilbertraums \mathcal{H} ($D = \dim(\mathcal{H}) = (2s + 1)^N$).

4.1.1 Rotation von spin-kohärenten Zuständen auf einem Kreis

Ziel ist es, eine Basis aus Produktzuständen zu konstruieren, wobei die Anzahl der Produktzustände der Dimension des Hilbertraums \mathcal{H} entspricht.

Durch die Darstellung von spin-kohärenten Zuständen in der komplexen Ebene oder auf einer Kugel bietet sich die folgende Vereinfachung an:

Wir betrachten den Äquator, d.h. $\theta = \pi/2$ und $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Die Anzahl der Zustände wird durch den Einzelspin s vorgegeben. Als Start-Zustand wählen wir $\phi = 0$, alle weiteren Zustände werden durch eine weitere Drehung um $\Delta\phi = \frac{2\pi}{2s+1}$ erzeugt. Es gibt $(2s + 1)$ -Zustände, wobei der Start-Zustand Ω_0 ist und für den k -ten Zustand gilt:

$$|\Omega_k\rangle = \left| \pi/2, \frac{2\pi}{2s+1} * k \right\rangle \quad \text{mit } 0 \leq k \leq 2s$$

Jetzt müssen wir die Produktzustände konstruieren. Für jedes Spin-System gibt es $(2s + 1)^N$ Zustände. Es ist naheliegend, die Produktzustände wie folgt zu konstruieren:

$$\begin{aligned} |\vec{\Omega}_0\rangle &= |0\rangle = |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_0, \Omega_0\rangle \hat{=} N\text{-Tupel} \\ |1\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_0, \Omega_1\rangle \\ &\vdots \\ |2s\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_0, \Omega_{2s}\rangle \\ |2s+1\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_1, \Omega_0\rangle \\ |2s+2\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_1, \Omega_1\rangle \\ &\vdots \\ |4s\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_1, \Omega_{2s}\rangle \\ |4s+1\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0, \dots, \Omega_2, \Omega_0\rangle \\ &\vdots \\ |(2s+1)^N - 1\rangle &= |\Omega_{2s}, \Omega_{2s}, \dots, \Omega_{2s}, \Omega_{2s}\rangle \end{aligned}$$

Diese Konstruktions-Vorschrift ist analog zu dem kombinatorischen Problem, eine Index-Menge $I = [0, 2s]$ auf N Stellen zu verteilen, wobei jeder Index mehrfach vorkommen darf.

4.2 Resultate

4.2.1 Spin-Dimer

Zur Überprüfung der numerischen Ergebnisse empfiehlt es sich, bei kleinen Spin-Systemen anzufangen.

Der Spin-Dimer [9] ist das einfachste Konstrukt, bestehend aus zwei gekoppelten Spins. Für $s = 1/2$ ist die Dimension des Hilbertraums $D = (2s + 1)^N = 4$. Die Eigenwerte lassen sich leicht berechnen. Der Hamilton-Operator lässt mit $\vec{\tilde{S}} = \vec{\tilde{s}}_0 + \vec{\tilde{s}}_1$ sich umformen zu:

$$\begin{aligned} \underline{H} |S, M\rangle &= \left(\vec{\tilde{S}}^2 - \vec{\tilde{s}}_0^2 - \vec{\tilde{s}}_1^2 \right) |S, M\rangle \\ &= S(S+1) - s_0(s_0+1) - s_1(s_1+1) |S, M\rangle \\ &= E(S) |S, M\rangle , \end{aligned}$$

wobei sich die Spin-Zustände $|S, M\rangle$ zusammensetzen aus S - der Gesamtspin-Quantenzahl und M - der magnetischen Quantenzahl.

Für den Spin-Dimer gilt: $S = 0$ oder $S = 1$, $-S \leq M \leq S$ und $s_0 = s_1 = 1/2$. Also gilt für die Energie:

$$E(S) = S(S+1) - 2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right) = S(S+1) - \frac{3}{2} .$$

Abschließend erhält man folgende Energiewerte:

$$\begin{aligned} E(0) &= 0 - \frac{3}{2} = -\frac{3}{2} \quad \text{und} \\ E(1) &= 1 - \frac{3}{2} = \frac{1}{2} , \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei $E(0)(|0, 0\rangle)$ nicht entartet und $E(1)(|1, -1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle)$ dreifach entartet ist.

Wir wollen das Verfahren aus Abschnitt 4.1.1 an diesem Beispiel veranschaulichen.

Der Hamilton-Operator vereinfacht sich mit Gleichung (3.1) zu

$$\underline{H} = \vec{\tilde{s}}_0 \cdot \vec{\tilde{s}}_1 + \vec{\tilde{s}}_1 \cdot \vec{\tilde{s}}_0 = 2 \vec{\tilde{s}}_0 \cdot \vec{\tilde{s}}_1 . \tag{4.2}$$

Wir erhalten als Produktzustände nach Abschnitt 4.1:

$$\begin{aligned}
|0\rangle &= |\Omega_0, \Omega_0\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle \\
|1\rangle &= |\Omega_0, \Omega_1\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle \\
|2\rangle &= |\Omega_1, \Omega_0\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle \\
|3\rangle &= |\Omega_1, \Omega_1\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle .
\end{aligned}$$

Die Pfeile dienen der geometrischen Veranschaulichung, da es beim Spin-Dimer nur die Winkel $\theta_0 = \theta_1 = \pi/2$, $\phi_0 = 0$ und $\phi_1 = \pi$ gibt.

Bildet man die Überlappmatrix, so sieht man, dass der Überlapp bei den nicht-diagonalen Elementen verschwindet:

$$\hat{O} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (4.3)$$

Damit hat man eine Basis aus Produktzuständen.

Für die Matrix des Hamilton-Operators errechnet man:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} . \quad (4.4)$$

In dem von mir entwickelten Programm wird überprüft, ob man Gleichung (2.37) verwenden kann.

Diagonalisiert man diese Matrix \hat{H} , erhält man die gleichen Eigenwerte wie in Gleichung (4.1).

Betrachtet man die Eigenvektoren, so gilt

$$|\psi_i\rangle = \sum_j^N c_{ij} |\vec{\mu}_j\rangle , \quad (4.5)$$

wobei c_{ij} die Komponenten aus der Eigenvektor-Matrix sind.

Für den Grundzustand und ersten angeregten Zustand erhält man

$$|\psi_0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |2\rangle) \quad (4.6)$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) . \quad (4.7)$$

Die Ergebnisse aus Gleichung (4.6) und Gleichung (4.7) stimmen bis auf den komplexen Vorfaktor i mit den Ergebnissen aus der Literatur [10] überein

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (4.8)$$

$$|1,-1\rangle = |1,0\rangle = |1,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad , \quad (4.9)$$

wobei die Produktzustände $|\uparrow\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\uparrow\rangle$, aus Gleichung (4.8) und Gleichung (4.9), die Eigenzustände des \hat{s}_z -Operators sind.

Für die Energie im Grundzustand erhält man $E_0 = -\frac{3}{2}$. Die Energie des ersten angeregten Zustandes ist $E_1 = \frac{1}{2}$

An diesem Beispiel sieht man zum einen, dass Produktzustände aus spin-kohärenten Zuständen, welche auf dem Äquator liegen, eine Basis im Hilbertraum bilden.

Zum anderen sind die spin-kohärenten Zustände äquivalent zu den Eigenzuständen des \hat{s}_z -Operators, da die spin-kohärenten Zustände und die Spin-Zustände, im Fall $s = 1/2$, die selbe Schrödinger-Gleichung lösen.

Für die Zustände $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ ist die Überlappmatrix immer die Einheitsmatrix \hat{E} und somit hat die Überlappmatrix vollen Rang

$$\text{Rang}(\hat{E}) = \text{Rang}(\hat{O}) = \dim(\mathcal{H}) = D \quad . \quad (4.10)$$

Aus Gleichung (3.5) wird dann

$$\sum_j c_j' [H_{ij} - E_\nu \delta_{ij}] = 0$$

$$\Leftrightarrow \left(\hat{H} - E_\nu \right) |\psi_\nu\rangle = 0$$

und wir erhalten die Schrödinger-Gleichung für orthogonale Basen.

4.2.2 Spontane Entartung

Bei den verschiedenen Systemen erhält man mit den beiden Verfahren das korrekte Spektrum, jedoch kann es bei bestimmten Spin-Systemen zur spontanen Entartung kommen. Dies ist der Fall für Ringe mit $N \geq 4$ und beim Oktaeder. Beim Tetraeder und für kleine Ringe $N \leq 3$ wurde in den von mir berechneten Fällen keine spontane Entartung beobachtet.

Unter spontaner Entartung versteht man, dass es zu den selben Energiewerten E_ν verschiedene Gesamtspin-Quantenzahlen S_ν gibt.

Physikalisch lässt sich die spontane Entartung wie folgt erklären. In der Basis der spin-kohärenten Zustände sind die Eigenzustände von \tilde{H} keine gemeinsamen Eigenzustände von \tilde{S}^2 und \tilde{S}_z . So kommt es zur spontanen Entartung und S_ν ist dann keine gute Quantenzahl mehr.

Beispiele für spontane Entartung siehe Abbildung 8 und Abbildung 9.

4.2.3 Weitere Beispiele

Die hier gezeigten Konstruktionsverfahren für die Produktzustände sind universell anwendbar. Es genügt, einfach die Kopplungsmatrix dem System anzupassen.

Als Beispiel gibt es eine Übersicht über die Spektren vom Tetraeder (Abbildung 7) und Oktaeder mit $s = 1$ (Abbildung 9) und einem 10er-Ring (Abbildung 8) mit $s = 1/2$.

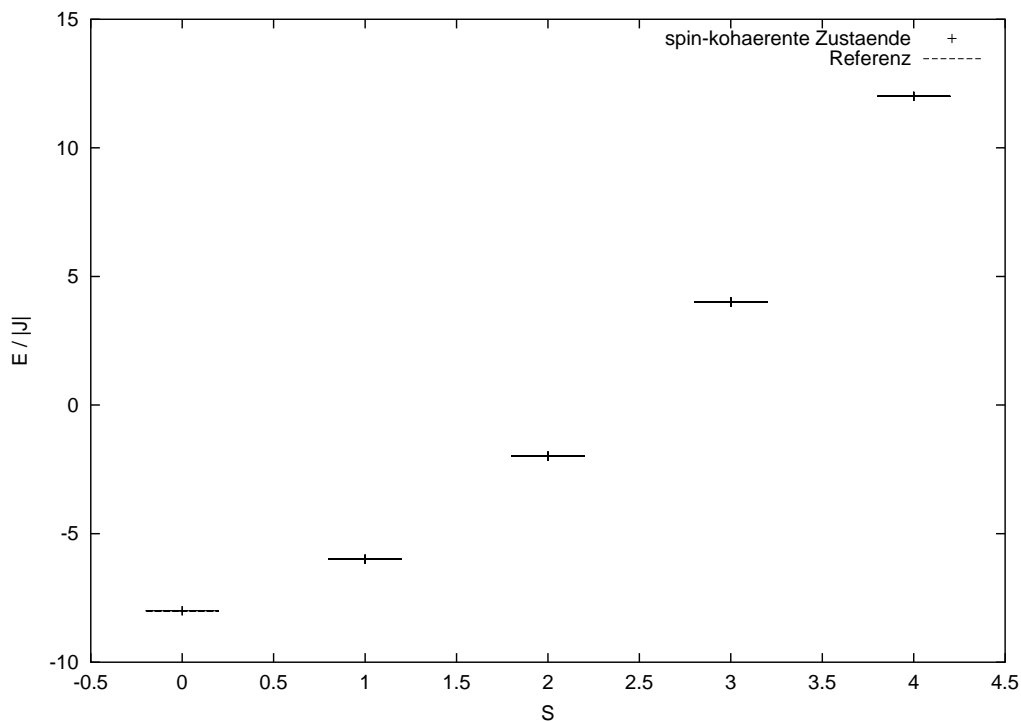


Abbildung 7: Spektrum eines Tetraeders mit $s = 1$ und $D = 81$. Bei diesem einfachen Spin-System tritt keine spontane Entartung auf.

Die numerische Berechnung der Spektren teilt sich auf in zwei Schritte. Der erste

Schritt berechnet die Eigenwerte und die Eigenvektoren. Im zweiten Schritt, welcher besonders zeitaufwendig ist, wird der Erwartungswert $\langle \vec{S}^2 \rangle_\nu$ berechnet. Eine Übersicht über den benötigten Arbeitsspeicher befindet sich im Anhang A.7.

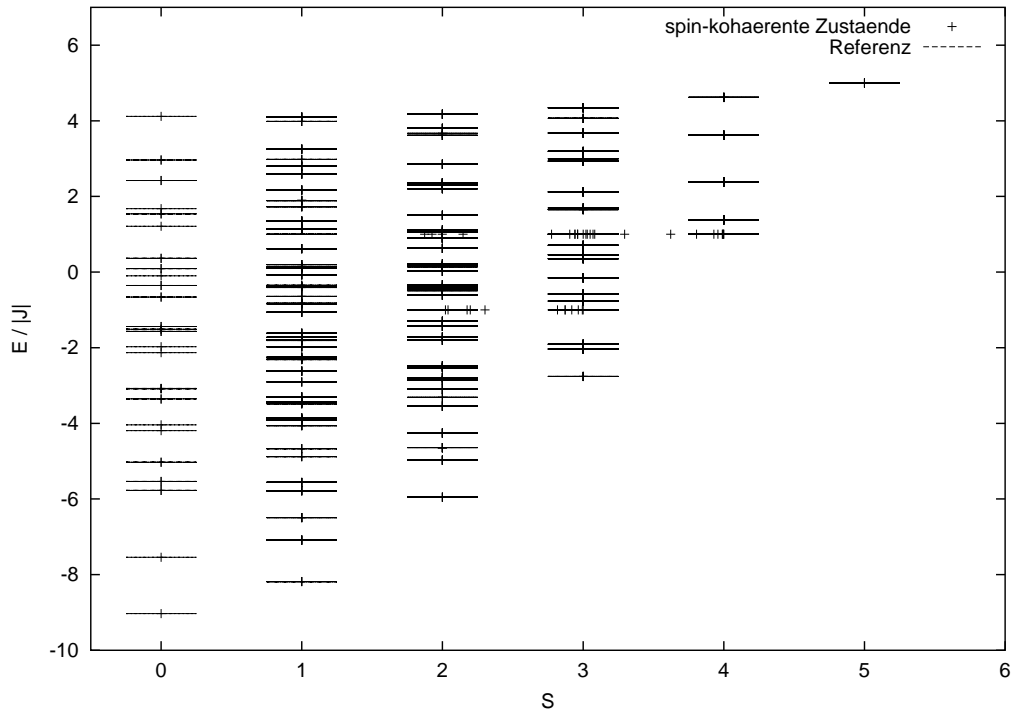


Abbildung 8: Spektrum eines 10er-Ringes mit $s = 1/2$ und $D = 1024$. Spontane Entartung tritt bei $E = -1$ und $E = 1$ auf.

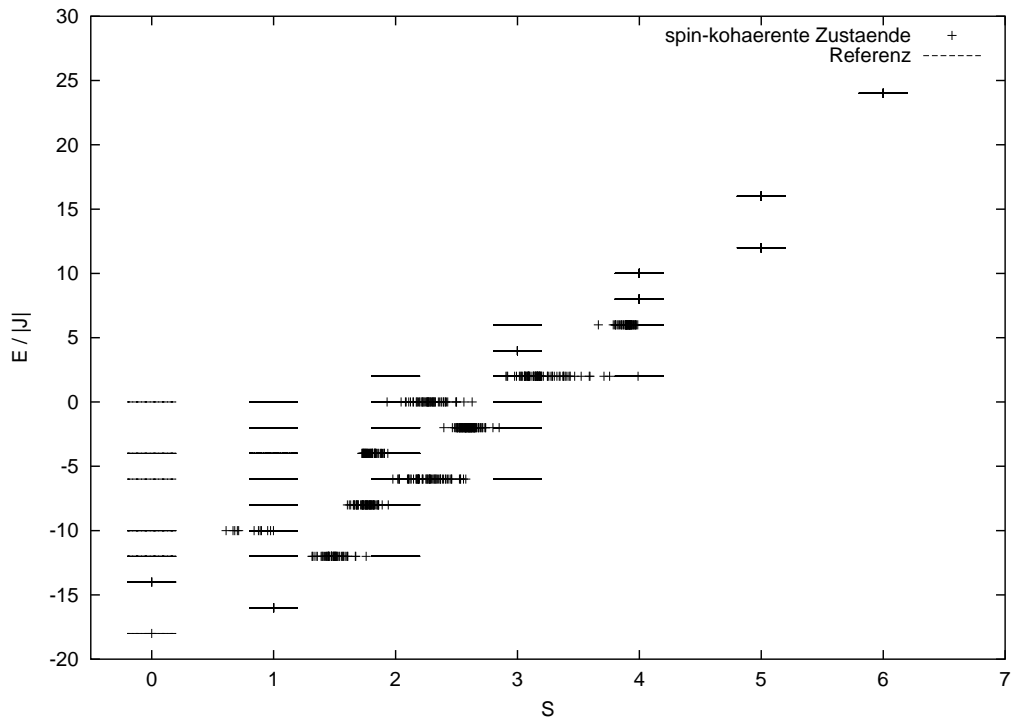


Abbildung 9: Spektrum eines Oktaeders mit $s = 1$ und $D = 729$. Fast alle Zustände, außer im tief- und hoch-liegenden Teil des Spektrum sind spontan entartet.

Die in Abbildung 7 bis Abbildung 9 gezeigten Referenzwerte wurden von PD Dr. Jürgen Schnack (FB Physik, Universität Osnabrück) zur Verfügung gestellt.

5 Approximative Diagonalisierung

In diesem Abschnitt behandeln wir Spin-Systeme, in denen die Produktzustände nicht den gesamten Hilbertraum \mathcal{H} aufspannen, sondern nur einen Teil-Hilbertraum \mathcal{H}^a . Von besonderem Interesse ist die Wahl der Dimension d von \mathcal{H}^a und die Frage: „Welche Zustände sind überhaupt geeignet?“.

5.1 Was wir aus dem klassischen Grundzustand lernen können

Bevor wir mit der Suche nach einem geeigneten Approximationsverfahren anfangen können, müssen wir uns mit dem klassischen und quantenmechanischen Grundzustand beschäftigen.

Beginnen wir mit der klassischen Hamilton-Funktion. Sie ist analog zum Hamilton-Operator \tilde{H} , mit dem Unterschied, dass anstatt der Spin-Operatoren die Spin-Vektoren stehen

$$H^{\text{klass}} = \sum_{k,l} J_{kl} \vec{s}_k \cdot \vec{s}_l . \quad (5.1)$$

Für die Länge der Spin-Vektoren findet man

$$|\vec{s}_k| = \hbar \sqrt{s_k(s_k + 1)} , \quad (5.2)$$

s_k entspricht der Spin-Quantenzahl.

Für den Spin-Dimer ($s=1/2$) erhält man analog zu Gleichung (3.1)

$$H^{\text{klass}} = 2 \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_1 . \quad (5.3)$$

Das Skalarprodukt ist minimal genau dann, wenn die Spin-Vektoren antiparallel zueinander stehen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann man wählen

$$\vec{s}_0 = \uparrow = \sqrt{\frac{3}{4}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{s}_1 = \downarrow = \sqrt{\frac{3}{4}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (5.4)$$

Der Vorfaktor ergibt sich aus der Länge der Spin-Vektoren mit den Spin-Quantenzahlen $s_0 = s_1 = 1/2$.

Für die Spin-Vektoren aus Gleichung (5.4) ist die Hamilton-Funktion minimal, und wir erhalten

$$H_{\text{min}}^{\text{klass}} = 2 \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{3}{2} . \quad (5.5)$$

Für den Spin-Dimer erhält man klassisch und quantenmechanisch die selbe Grundzustandsenergie.

Man kann spin-kohärente Zustände über den Erwartungswert von \vec{s} mit den Spin-Vektoren vergleichen:

$$\begin{aligned} \left\langle \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0 \mid \vec{s} \mid \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0 \right\rangle &= \frac{1}{2} \vec{n} \left(\frac{\pi}{2}, 0 \right) \propto \uparrow \\ \left\langle \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \pi \mid \vec{s} \mid \theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \pi \right\rangle &= \frac{1}{2} \vec{n} \left(\frac{\pi}{2}, \pi \right) \propto \downarrow . \end{aligned}$$

Der Vektor \vec{n} kommt aus der Winkeldarstellung (Anhang A.2) und zeigt, je nach Winkel, in die selbe Richtung wie \vec{s}_0 oder \vec{s}_1 .

Für größere Spin-Systeme ($s > 1/2$, $N > 2$) kann man den quantenmechanischen Grundzustand mit antiparallelen Spins nur approximieren [11].

Betrachten wir als Beispiel einen 6er-Ring mit antiferromagnetischer Kopplung und Nächste-Nachbar-Wechselwirkung ($s = 1/2$). Man wählt als Produktzustände

$$\mid \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \rangle \quad \text{und} \quad \mid \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle . \quad (5.6)$$

Solche Zustände nennt man auch Néel-angeordnete Zustände oder einfach Néel-Zustände.

Für den quantenmechanischen Grundzustand und den ersten angeregten Zustand kann man approximieren [11]

$$\mid \psi_0 \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mid \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \rangle + \mid \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle \right) \quad (5.7)$$

$$\mid \psi_1 \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mid \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \rangle - \mid \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle \right) . \quad (5.8)$$

Die Zustände $\mid \psi_0 \rangle$ und $\mid \psi_1 \rangle$ bestehen analog zu der Hamilton-Funktion aus antiparallelen Zuständen. Solche Zustände kann man auch als alternierende Zustände bezeichnen. Alternierende Zustände müssen aber nicht antiparallel ausgerichtet sein.

Damit haben wir eine Vorstellung, wie man mit klassischen Grundzuständen einen quantenmechanischen Grundzustand formulieren kann.

5.1.1 Erzeugen von Produktzuständen mit Zufallszahlen

Ziel dieses Abschnittes ist es, Produktzustände aus Zufallszahlen zu erzeugen, welche eine Basis in \mathcal{H}^q aufspannen. Verfahren, die mit Hilfe von Zufallszahlen ein physikalisches System simulieren, nennt man Monte-Carlo-Verfahren [12].

Für jeden spin-kohärenten Zustand braucht man $2N$ Zufallszahlen. Da es sich bewährt hat, erst die Winkel zu berechnen, muss man dafür sorgen, dass die Kugeloberfläche gleichmäßig mit Vektoren, welche aus den Winkeln θ und ϕ gebildet werden, bedeckt ist. Wie man solche Zufallszahlen produziert, wird im Anhang A.3 erklärt. Die Anzahl der Produktzustände d kann man einfach vorgeben.

Warum funktioniert das Monte-Carlo Verfahren? – Das Verfahren funktioniert genau dann, wenn wir eine Basis aus Produktzuständen erhalten. Eine Basis besteht aus linear unabhängigen Produktzuständen. Die Wahrscheinlichkeit, zwei linear abhängige Produktzustände mit Zufallszahlen zu erzeugen, ist sehr gering. Für eine vorgegebene Dimension d braucht man $(2Nd)$ Zufallszahlen.

Bei unserem Monte-Carlo Verfahren benutzen wir erstmal keine weiteren Informationen über den Grundzustand. In dem erzeugten Teil-Hilbertraum \mathcal{H}^q ist nicht zu erwarten, dass der Grundzustand darin enthalten ist. Da \tilde{H} auf einem Teil-Hilbertraum \mathcal{H}^q beschränkt ist, gibt es immer Zustände mit minimaler Energie. Diese Zustände stimmen aber nicht mit dem wahren Grundzustand überein, sondern sie liegen energetisch über dem wahren Grundzustand. Dies ist die Aussage des Ritz'sche Variationsprinzips (vergleiche Anhang A.6).

Es bedarf eines Verfahrens, welches uns nur die niedrigsten approximierten Zustände liefert. Folgendes Verfahren hat sich dabei bewährt

- Erzeuge gleichverteilte Zufallszahlen: $r_i \in [0, 1]$.

- Für gleichverteilte zufällige Kugel-Koordinaten gilt:

$$\begin{aligned}\theta &= \arccos(1 - 2 r_\theta) \in [0, \pi] \\ \phi &= 2\pi r_\phi \in [0, 2\pi] .\end{aligned}$$

- Bilde d Produktzustände, wobei jeder Zustand aus $2N$ Zufallszahlen besteht.
- Löse die Schrödinger-Gleichung (falls möglich).
- Vergleiche E_{\min} mit einem gegebenen Startwert oder mit dem niedrigsten E_{\min} aus den vorherigen Schritten.
- Behalte den kleinsten Eigenwert E_{\min} und die dazugehörigen Produktzustände.
- Wiederhole Zyklus x -mal ($x \simeq 100$).

Als Beispiel betrachten wir einen 4er-Ring mit $s = 1$ mit verschiedenen Dimensionen d .

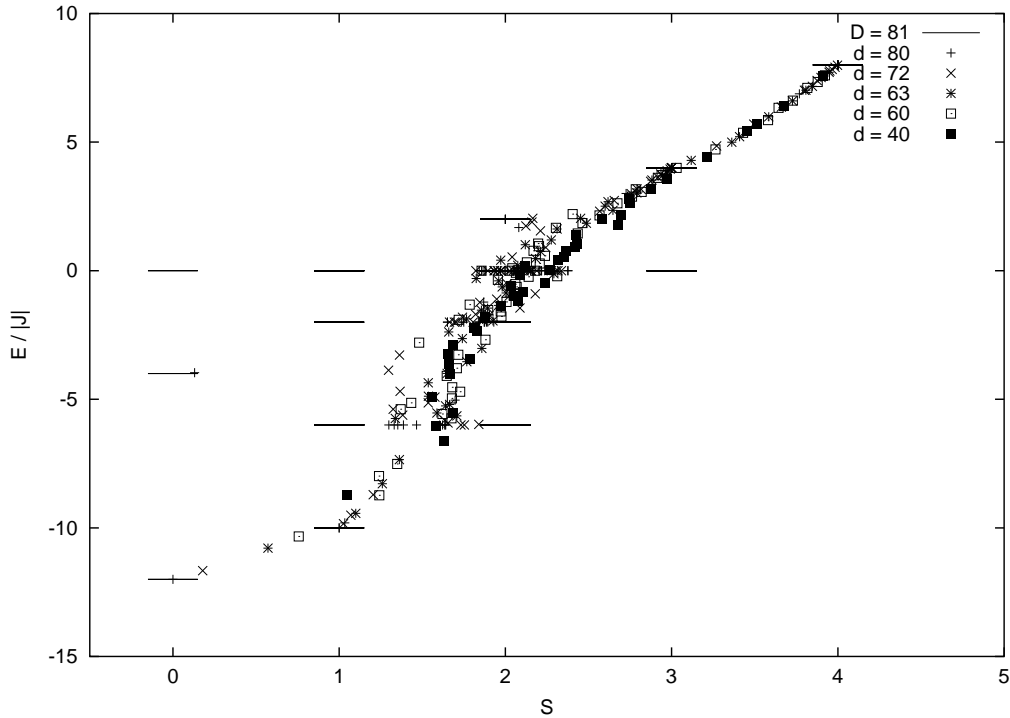


Abbildung 10: Reduzierung der Dimension am Beispiel 4er-Ring mit $s = 1$. Die Anzahl der Wiederholungs-Zyklen beträgt 10 Schritte (Referenzwerte J.Schnack).

Aus Abbildung 10 kann man entnehmen, dass der Grundzustand (zwischen $S = 0$ und $S = 1$, dann oberhalb des ersten angeregten Zustandes) mit sinkender Dimension auf einer annähernd parabelförmigen Bahn in Richtung des ferromagnetischen Grundzustandes wandert. Ebenfalls wandern alle anderen Zustände in die selbe Richtung.

5.2 Vektorbedingung für Produktzustände aus spin-kohärenten Zuständen

Wenden wir uns nochmal dem Verfahren aus Abschnitt 4.1 zu. Es ist möglich, sich nur auf die Produktzustände zu beschränken, welche eine bestimmte Eigenschaft haben. Nach den Überlegungen aus Abschnitt 5.1 bietet sich an, nur

Produktzustände zu wählen, die eine minimale Länge ϵ haben:

$$| \langle \vec{\mu}_i | \vec{\zeta} | \vec{\mu}_i \rangle | = \left| \sum_k \langle \mu_k^i | \vec{\zeta} | \mu_k^i \rangle \right| = \epsilon . \quad (5.9)$$

Für einen Ring mit $N = 4$ und $s = 1/2$ wären das die Zustände:

$$| \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle, | \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \rangle, | \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle, | \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \rangle, | \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \rangle, | \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \rangle ,$$

und die minimale Länge ist $\epsilon = 0$. Damit wird ein Untervektorraum \mathcal{H}^q aus dem Hilbertraum \mathcal{H} erzeugt. Gleichzeitig ist damit auch die Dimension d festgelegt.

Schauen wir uns diesen Ansatz an dem Beispiel des 8er-Rings mit $s = 1/2$ etwas genauer an, vergleiche Abbildung 11.

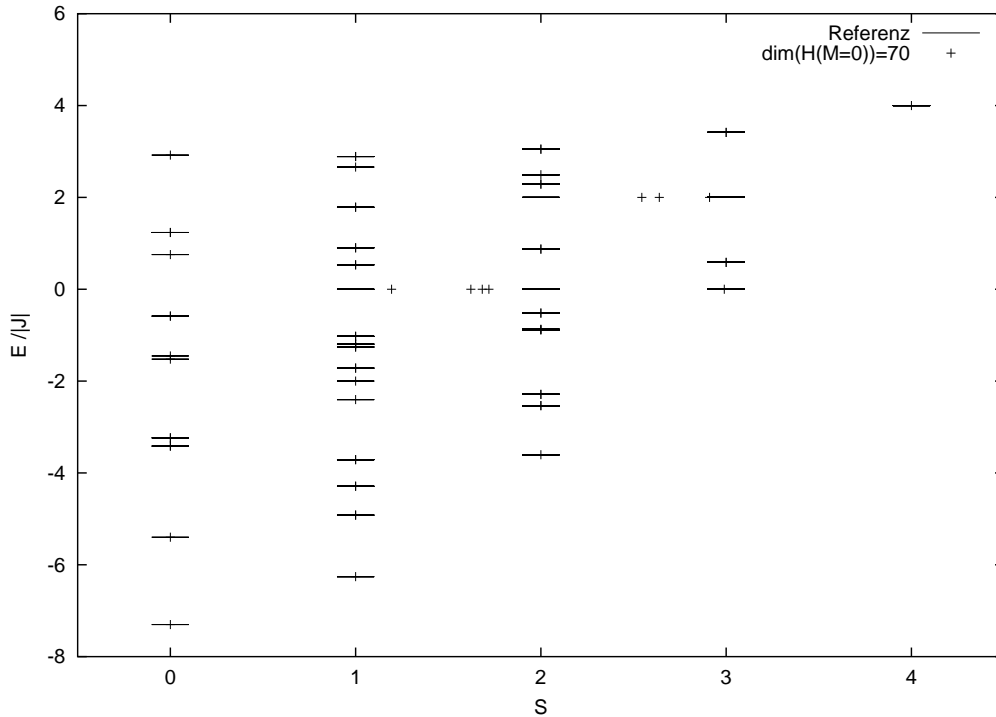


Abbildung 11: Spektrum mit Vektorbedingung am Beispiel des 8er-Rings mit $s = 1/2$ und $d = 70$ (Referenzwerte J. Schnack).

Die Dimension des ganzen Hilbertraums ist $D = 256$ und durch die Vektorbedingung wurde ein Untervektorraum mit der Dimension $d = 70$ abgeteilt.

Aus Abbildung 11 kann man entnehmen, dass jeder Zustand besetzt ist, abgesehen von der spontanen Entartung. Alle Zustände sind mindestens einmal besetzt,

einige sind mehrfach besetzt (entartet).

Das Ergebnis stimmt mit der Erwartung überein, da wir es hier mit einem Sonderfall zu tun haben, bei dem die spin-kohärenten Zustände gerade mit den Eigenzuständen des Operators \underline{s}_z übereinstimmen. Insbesondere ist die Vektorbedingung (5.9) äquivalent zu der Bedingung den Teil-Hilbertraum mit $M = 0$ zu konstruieren. Wir haben einen Untervektorraum erzeugt mit der Bedingung $\mathcal{H}^q = \mathcal{H}(M = 0)$. Diese Bedingung ist bei allen Zuständen erfüllt, da für die Quantenzahlen S und M die gleichen Bedingungen gelten wie beim Spin-Dimer aus Abschnitt 4.2, mit dem Unterschied, dass die Anzahl der Spins hier größer ist und daraus folgt $0 \leq S \leq 4$.

Für die Berechnung von $\dim(\mathcal{H}(M))$ hat man folgenden Zusammenhang gefunden [13]:

$$\dim(\mathcal{H}(M)) = \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{Ns-M}{2s+1} \rfloor} (-1)^i \binom{N}{i} \binom{N-1+Ns-M-i(2s+1)}{N-1}. \quad (5.10)$$

Für größere Spins $s > 1/2$ entsprechen die spin-kohärenten Zustände nicht mehr den Spin-Eigenzuständen. Es hat sich hierzu auch kein weiterer brauchbarer Ansatz finden lassen.

5.3 Untergitter und spin-kohärente Zustände

In diesem Teil wollen wir uns mit den Untergittern beschäftigen. Die Anzahl der Untergitter ist bestimmt durch die Kolorierung des Spin-Systems. Der Begriff Kolorierung [14] kommt aus der Graphen-Theorie. Darunter versteht man, Spins mit verschiedenen Farben zu markieren.

Schafft man es mit zwei Farben, alle Spins zu markieren, so dass zwei benachbarte Spins nicht die selbe Farbe haben, hat man eine 2-kolorierbares Spin-System. Zum Beispiel hat ein Ring mit gerader Spinanzahl zwei Untergitter.

Die Steigerung ist ein 3-kolorierbares Spin-System, dazu gehört das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder. In Abbildung 6 und Abbildung 4 sind die beiden Körper mit ihren Untergittern A, B und C dargestellt. Man sieht, dass auf jedem Dreieck je ein Spin aus verschiedenen Untergittern platziert ist. Für die Beschreibung der Untergitter kann man also auch die Farben rot, grün und blau anschaulich benutzen.

Wenden wir uns jetzt dem klassischen Grundzustand zu. In Abschnitt 5.1 ist der klassische Grundzustand aus alternierenden Spins zusammengesetzt, siehe

Gleichung (5.6). Es ist also naheliegend, zum Beispiel bei einem geraden Ring solche alternierenden Produktzustände zu wählen.

Folgendes Verfahren hat sich dabei bewährt:

Monte Carlo + Ritzsches Variationsprinzip

- Die Dimension d des Teil-Hilbertraums \mathcal{H}^q wird vorgegeben.
- Für den Basisvektor $|\vec{\mu}_i\rangle$ werden mit Zufallszahlen zwei spin-kohärente Zustände $|\mu_0\rangle$ und $|\mu_1\rangle$ erzeugt.
- Baue alternierenden Produktzustand: $|\mu_0, \mu_1, \mu_0, \mu_1 \dots\rangle$ (N -Tupel).
- Bilde Hamilton- und Überlapp-Matrix.
- Diagonalisieren $\Rightarrow E_0, |\Psi_0\rangle$.
- vergleiche E_0 mit vorherigem Wert (oder Startwert), wähle kleinstes E_0 .
- wiederhole x -mal ($x \simeq 100$).

Wir wollen das Verfahren an einem Beispiel verdeutlichen. In Abbildung 12 wurde das Verfahren an einem 4er-Ring mit $s = 3$ angewendet. Die Dimension d wurde so gewählt, dass der Grundzustand nach 100 Zyklen erreicht wurde.

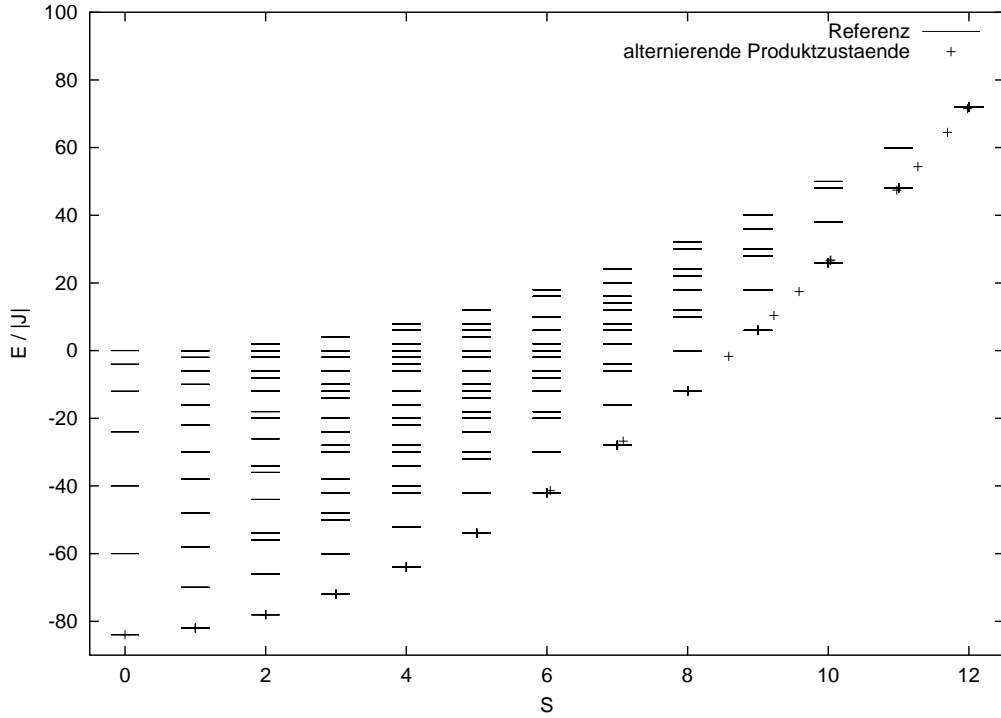


Abbildung 12: Maximaler Spin auf Untergittern am Beispiel 4er-Ring mit $s = 3$. $D = 2401$ und $d = 165$ (Referenzwerte J. Schnack).

Das Resultat zeigt, dass alle Zustände auf dem untersten Rotationsband [15] liegen. Für kleine S liegen die Zustände sogar exakt auf den Referenzwerten.

Warum erhält man gerade das unterste Rotationsband? – Die Antwort ist gegeben in [16]. Man kann das unterste Rotationsband durch den Rotationsband-Operator approximieren. Der Rotationsband-Operator H_{rot} hat für 2-kolorierbare Systeme folgende Gestalt

$$H_{\text{rot}} = - \left[\vec{S}^2 - (\vec{S}_A^2 + \vec{S}_B^2) \right] , \quad (5.11)$$

man findet dann für die Energie

$$E(S) = - [S(S + 1) - (S_A(S_A + 1) - S_B(S_B + 1))] . \quad (5.12)$$

Die Untergitter-Spin-Quantenzahlen können Werte von 0 bis $Ns/2 = 6$ annehmen. Bei maximalen Quantenzahlen $S_A = S_B = 6$ und $S = 0$ erhält man $E(0) = -84$. Mit dem Rotationsband-Operator erhält man das gleiche Ergebnis wie mit den alternierenden Produktzuständen.

Abschließend muss man noch anmerken: Wählt man eine kleinere Dimension ($d < 165$), findet man mit dem Verfahren keine Lösungen mehr, die den Grundzustand

enthalten. Man bleibt aber weiterhin auf dem Rotationsband.

Die Dimension des Hilbertraums mit $M = 0$ berechnet sich mit Gleichung (5.10) zu $\dim(\mathcal{H}(0)) = 231$. Das heißt, wir sind mit weniger Zuständen ausgekommen als man nach Gleichung (5.10) erwarten würde.

5.4 Der Rotationsband-Operator

In den letzten Abschnitten haben wir erkannt, dass es möglich ist, bei geschickter Wahl der Produktzustände das Rotationsband zu berechnen. In diesem Abschnitt wollen wir die Eigenschaften des Rotationsband-Operators weiter erörtern. Es ist möglich, das Rotationsband nur durch die Abhängigkeit von S und $(S + 1)$ zu berechnen ([15] und Gleichung (5.12)).

Wir werden zeigen, dass die alternierenden Produktzustände, wie aus Abschnitt 5.3, einen Untervektorraum aufspannen. In diesem Untervektorraum sind die Matrixelemente des Heisenberg-Hamilton-Operators \tilde{H} und die Matrixelemente des Rotationsband-Operators \tilde{H}_{rot} zueinander proportional

$$\langle \tilde{\mu}_i | \tilde{H} | \tilde{\mu}_j \rangle \propto \langle \tilde{\mu}_i | \tilde{H}_{\text{rot}} | \tilde{\mu}_j \rangle . \quad (5.13)$$

Der Rotationsband-Operator \tilde{H}_{rot} hat bei 2-kolorierbaren beziehungsweise 3-kolorierbaren Systemen folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{rot}}^{2\text{-cycl}} &= \tilde{\vec{S}}^2 - \tilde{\vec{S}}_A^2 - \tilde{\vec{S}}_B^2 \\ &= 2 \tilde{\vec{S}}_A \cdot \tilde{\vec{S}}_B \\ \tilde{H}_{\text{rot}}^{3\text{-cycl}} &= \tilde{\vec{S}}^2 - \tilde{\vec{S}}_A^2 - \tilde{\vec{S}}_B^2 - \tilde{\vec{S}}_C^2 \\ &= 2 \tilde{\vec{S}}_A \cdot \tilde{\vec{S}}_B + 2 \tilde{\vec{S}}_B \cdot \tilde{\vec{S}}_C + 2 \tilde{\vec{S}}_A \cdot \tilde{\vec{S}}_C , \end{aligned} \quad (5.14)$$

wobei mit $\tilde{\vec{S}}$ jeweils die Summe der Untergitter-Operatoren gemeint ist.

5.4.1 Verallgemeinerung für gerade Ringe

Da die Kopplungsmatrix für Ringe sehr einfach ist, benutzen wir den vereinfachten Hamilton-Operator aus Gleichung (3.1).

Für die nun folgende Rechnung setzen wir voraus, dass wir eine gerade Anzahl an Spins haben.

Wir verallgemeinern die Produktzustände zu N -Tupeln wie folgt:

$$\begin{aligned} |\vec{\mu}_i\rangle &= |\alpha, \beta, \dots, \alpha, \beta\rangle \\ |\vec{\mu}_j\rangle &= |\gamma, \delta, \dots, \gamma, \delta\rangle \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} \alpha &= \mu_0^i = \mu_2^i = \dots = \mu_{N-2}^i & \beta &= \mu_1^i = \mu_3^i = \dots = \mu_{N-1}^i \\ \gamma &= \mu_0^j = \mu_2^j = \dots = \mu_{N-2}^j & \delta &= \mu_1^j = \mu_3^j = \dots = \mu_{N-1}^j . \end{aligned}$$

Somit sind $|\vec{\mu}_i\rangle$ und $|\vec{\mu}_j\rangle$ alternierende Produktzustände.

Der Hamilton-Operator (3.1) besteht nur aus Produkten, die jeweils einen ungeraden und geraden Index enthalten

$$\vec{H} = \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_1 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \dots + \vec{s}_{N-1} \cdot \vec{s}_0 . \quad (5.15)$$

Insgesamt enthält der Operator N Produkte. Für das Matrixelement gilt dann:

$$\langle \vec{\mu}_i | \vec{H} | \vec{\mu}_j \rangle = 2 N s \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \vec{e}_{\alpha\gamma} \cdot \vec{e}_{\beta\delta} ,$$

wobei $\vec{e}_{\alpha\gamma} = \langle \alpha | \vec{s}_k | \gamma \rangle / (s \langle \alpha | \gamma \rangle)$ ist.

Die Matrix des Rotationsband-Operators kann man auf die gleiche Weise vereinfachen.

$$\begin{aligned} \vec{H}_{\text{rot}}^{2\text{-cycl}} &= 2 \vec{S}_A \cdot \vec{S}_B = \left(\vec{s}_0 + \vec{s}_2 + \dots + \vec{s}_{N-2} \right) \left(\vec{s}_1 + \vec{s}_3 + \dots + \vec{s}_{N-1} \right) \\ &= \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_1 + \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_3 + \dots + \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_{N-1} \\ &\quad + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_1 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \dots + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_{N-1} \\ &\quad + \dots + \vec{s}_{N-2} \cdot \vec{s}_{N-1} . \end{aligned}$$

Das Produkt enthält $N/2 \times N/2$ einzelne Produkte, die ebenfalls ungerade und gerade Indizes enthalten. Also erhält man:

$$\langle \vec{\mu}_i | \vec{H}_{\text{rot}}^{2\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle = s \frac{N^2}{2} \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \vec{e}_{\alpha\gamma} \cdot \vec{e}_{\beta\delta} .$$

Der Hamilton-Operator ist genau dann gleich dem Rotationsband-Operator, wenn gilt:

$$2 N s = s \frac{N^2}{2} \Leftrightarrow N = 4 .$$

Das bedeutet, dass für $N = \text{gerade}$ und $N > 4$ die Matrixelemente des Rotationsband-Operators ungleich der Matrixelemente des Hamilton-Operators (bezüglich der alternierenden Produktzustände) sind. Dies ist auch die Erklärung dafür, dass

das Rotationsband aus dem Beispiel in Abschnitt 5.3 so gut approximiert werden konnte.

Es ist möglich einen Skalierungsfaktor anzugeben:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \vec{\mu}_i | \tilde{H} | \vec{\mu}_j \rangle}{\langle \vec{\mu}_i | \tilde{H}_{\text{rot}}^{2\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle} &= \frac{2 N s}{s \frac{N^2}{2}} = \frac{4}{N} \\ \Leftrightarrow \langle \vec{\mu}_i | \tilde{H} | \vec{\mu}_j \rangle &= \frac{4}{N} \langle \vec{\mu}_i | \tilde{H}_{\text{rot}}^{2\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle . \end{aligned}$$

5.4.2 Beispiel für ein 3-kolorierbares System: Das Ikosidodekaeder

Bei 3-kolorierbaren Problemen ist der Produktzustand zusätzlich von der Kolorierung (R - Rot, G - Grün und B - Blau) abhängig, vergleiche Abbildung 6.

Wie wir sehen werden, ist es auch nicht notwendig, den Hamilton-Operator direkt anzuschauen, sondern es reicht, zu betrachten, welche Farben die Nachbarn an einer beliebigen Stelle haben.

Erzeugen wir zwei Produktzustände $|\vec{\mu}_i\rangle$ und $|\vec{\mu}_j\rangle$, wobei wir für jeden Produktzustand drei spin-kohärente Zustände wählen. Diese drei spin-kohärenten Zustände stehen jeweils für ein Untergitter.

Im folgenden betrachten wir nur Spin-Systeme, bei denen die Spins auf Dreiecken angeordnet sind (zum Beispiel Kuboktaeder oder Ikosidodekaeder). Da jeder Spin 4 Nachbarn mit zwei verschiedenen Farben hat, kann man verallgemeinern:

Jeder Spin hat vier Nachbarn, davon je zwei in einer anderen Farbe als er selbst.

Diese Verallgemeinerung gilt nur für Spin-Systeme mit vier nächsten Nachbarn.

Da es insgesamt für jede Farbe 10 Spins gibt, gilt für den Hamilton-Operator:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= 10 s \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle \\ &\quad \times \left(\underbrace{2 \vec{e}_{Rr} \cdot \vec{e}_{Gg} + 2 \vec{e}_{Rr} \cdot \vec{e}_{Bb}}_{\text{rot}} + \underbrace{2 \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + 2 \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr}}_{\text{grün}} \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{2 \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr} + 2 \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Gg}}_{\text{blau}} \right) \\ &= 40 s \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle (\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}) . \end{aligned}$$

Für die Untergitter gilt:

$$\begin{aligned}\vec{\tilde{S}} &= \vec{\tilde{S}}_R + \vec{\tilde{S}}_G + \vec{\tilde{S}}_B \\ \vec{\tilde{S}}^2 &= \vec{\tilde{S}}_R^2 + \vec{\tilde{S}}_G^2 + \vec{\tilde{S}}_B^2 \\ &\quad + 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot \vec{\tilde{S}}_G + 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot \vec{\tilde{S}}_B \\ &\quad + 2 \vec{\tilde{S}}_G \cdot \vec{\tilde{S}}_B .\end{aligned}$$

Für den Rotationsband-Operator gilt:

$$\vec{\tilde{S}}^2 - \vec{\tilde{S}}_R^2 - \vec{\tilde{S}}_G^2 - \vec{\tilde{S}}_B^2 = 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot \vec{\tilde{S}}_G + 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot \vec{\tilde{S}}_B + 2 \vec{\tilde{S}}_G \cdot \vec{\tilde{S}}_B .$$

Da jedes Untergitter aus 10 Spins besteht, besteht das Matrixelement aus 100 einzelnen Produkten, beziehungsweise aus $2 * 50$ Produkten der Form $\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}$.

Für die Matrixelemente des Rotationsband-Operators gilt:

$$\begin{aligned}\langle \vec{\mu}_i | H_{\text{rot}}^{3\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle &= \langle \vec{\mu}_i | 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot \vec{\tilde{S}}_G + 2 \vec{\tilde{S}}_R \cdot 2 \vec{\tilde{S}}_B + 2 \vec{\tilde{S}}_G \cdot \vec{\tilde{S}}_B | \vec{\mu}_j \rangle \\ &= 2 * 2 * 50 s \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle (\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}) \\ &= 200 s \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle (\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}) .\end{aligned}$$

Das Verhältnis der Matrixelemente des Hamilton-Operators zu denen des Rotationsband-Operators ist dann:

$$\frac{\langle \vec{\mu}_i | H | \vec{\mu}_j \rangle}{\langle \vec{\mu}_i | H_{\text{rot}}^{3\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle} = \frac{40}{200} = \frac{1}{5} = \frac{6}{30} .$$

Abbildung 13 zeigt das mit Monte Carlo + Ritzsches Variationsprinzip approximierte Rotationsband für den Ikosidodekaeder mit $s = 5/2$. Als Dimension wurde hier $d = 50$ gewählt. Der niedrigste Wert, den ich bis jetzt berechnet habe, liegt bei $E(2.5) = -388.2$ mit einer Dimension von $d = 3500$.

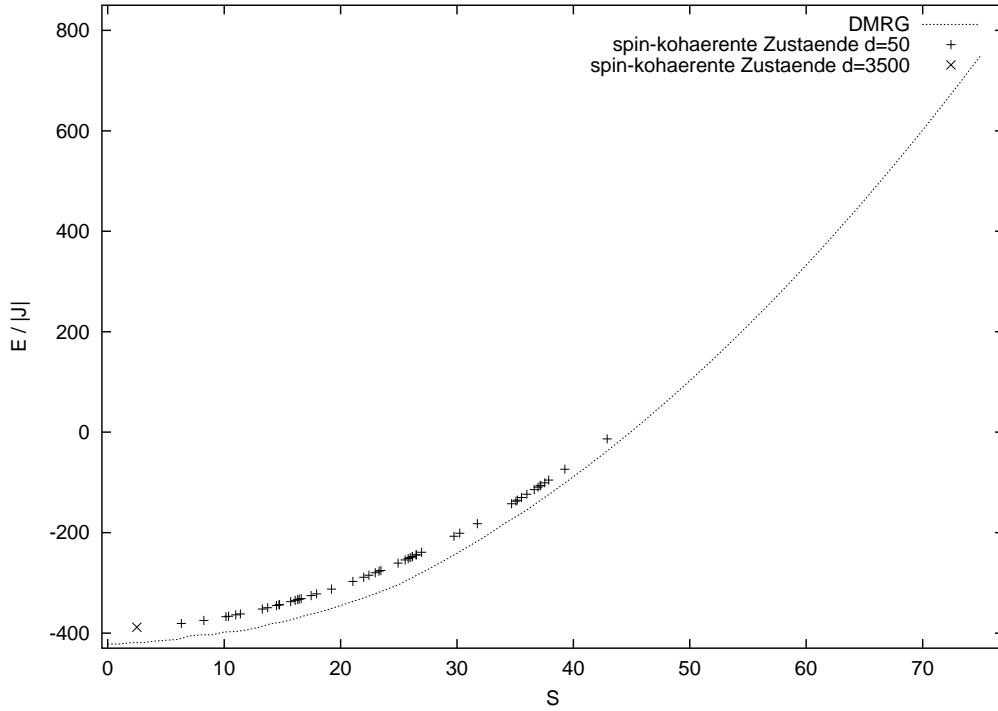


Abbildung 13: Ikosidodekaeder mit $s = 5/2$ mit Produktzuständen, die maximale Untergitter enthalten. Als Dimension wurde $d = 50$ gewählt. Wegen der deutlich längeren Laufzeit des Programms wird nur der niedrigste Wert für $d = 3500$ angegeben. Referenzwerte mit DMRG von Matthias Exler [17].

5.4.3 Verallgemeinerung für 3-kolorierbare Systeme mit vier nächsten Nachbarn

Mit zu Abschnitt 5.4.2 analogen Überlegungen kann man den Rotationsband-Operator für beliebige 3-kolorierbare Systeme aus dem Hamilton-Operator herleiten.

Für den Hamilton-Operator gilt:

$$\langle \vec{\mu}_i | \tilde{H} | \vec{\mu}_j \rangle = 4 s \frac{N}{3} \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle (\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}) \quad (5.16)$$

und für den Rotationsband-Operator findet man:

$$\langle \vec{\mu}_i | \tilde{H}_{\text{rot}}^{3\text{-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle = 2 s \left(\frac{N}{3} \right)^2 \langle \vec{\mu}_i | \vec{\mu}_j \rangle (\vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Bb} + \vec{e}_{Gg} \cdot \vec{e}_{Rr} + \vec{e}_{Bb} \cdot \vec{e}_{Rr}) \quad (5.17)$$

Für den Skalierungsfaktor gilt:

$$\frac{\langle \vec{\mu}_i | \widetilde{H} | \vec{\mu}_j \rangle}{\langle \vec{\mu}_i | \widetilde{H}_{\text{rot}}^{\text{3-cycl}} | \vec{\mu}_j \rangle} = \frac{\frac{4}{3} N}{\frac{2}{9} N^2} = \frac{6}{N} . \quad (5.18)$$

6 Zusammenfassung und Ausblick

In meiner Diplomarbeit habe ich mich hauptsächlich mit spin-kohärenten Zuständen und ihren Anwendungen für Spin-Systeme beschäftigt. Die wichtigsten Eigenschaften und Merkmale von spin-kohärenten Zuständen wurden hergeleitet. Es wurden die exakten Spektren von verschiedenen Spin-Systemen berechnet und diskutiert.

Ebenfalls wurden Methoden vorgestellt, mit denen es möglich ist, diese Spektren auch zu approximieren. In dem Zusammenhang wurde der Rotationsband-Operator und das Rotationsband ausführlich beschrieben. Die damit verbundene der Wahl der zur Approximation geeigneten Produktzuständen wurde erörtert.

Bei größeren Spin-Systemen, wie zum Beispiel dem Ikosidodekaeder, konnte der quantenmechanische Grundzustand nicht ausreichend gut approximiert werden, sondern nur das klassische Rotationsband. Es bedarf weiterer Überlegungen, welche Verfahren vom Rotationsband weg in Richtung des quantenmechanischen Grundzustandes führen.

Eine mögliche Erweiterung bietet das Importance-Sampling. Dabei versucht man, soweit wie möglich am Rotationsband herunter zu kommen, um eine möglichst gute Ausgangslage für weitere Verfahren zu bekommen. Dabei beschränkt man sich nur auf die Zustände, die zum Rotationsband beitragen. Über die Komponenten der Eigenvektor-Matrix hat man eine Möglichkeit

$$|\psi_\nu\rangle = \sum_i c_i^\nu |\vec{\mu}_i\rangle, \quad (6.1)$$

die unbedeutenden Zustände zu isolieren ($|c_i^\nu|^2 \approx 0$). Somit erhält man die wichtigsten Zustände, die auch tatsächlich zum Rotationsband beitragen.

Ein weiteres Verfahren sind kleine Verrückungen δ an jeder Komponente der übriggebliebenen Zustände. Damit ist es möglich, unterhalb des Rotationsbandes zu kommen. Es ist im Ansatz gelungen, Zustände zu erzeugen, welche unterhalb des Rotationsbandes ($E(0) = -390$) und damit näher am quantenmechanischen Grundzustand liegen.

Welche Verrückungen besonders gut geeignet sind, den Grundzustand zu approximieren, kann man an kleineren Spin-Systemen, wie zum Beispiel dem Kuboktaeder, weiter untersuchen.

A Anhang

A.1 Beweis des Vorfaktors

Es gilt zu zeigen:

$$\tilde{s}_-^p | 0 \rangle = \left(\frac{p! (2s)!}{(2s-p)!} \right)^{1/2} | p \rangle \quad \text{für } 0 \leq p \leq 2s . \quad (\text{A.1})$$

Die Behauptung beweise ich mittels vollständiger Induktion. Erst zeige ich, dass die Behauptung für $p = 1$ richtig ist (Induktionsanfang), dann für $p \Rightarrow p + 1$ (Induktionsschritt). Als Induktionsvoraussetzung (I.V.) benutze ich (A.1).

Induktionsanfang:

Für $p = 1$ folgt aus (2.7)

$$\tilde{s}_- | 0 \rangle = \sqrt{s(s+1) - (s-0)(s-0-1)} | 1 \rangle \stackrel{?}{=} \left(\frac{1!(2s)!}{(2s-1)!} \right)^{1/2} | 1 \rangle .$$

So ergibt sich für die linke Seite von „ $\stackrel{?}{=}$ “

$$\sqrt{s(s+1) - (s(s-1))} = \sqrt{2s}$$

und für die rechte Seite

$$\left(\frac{(2s)!}{(2s-1)!} \right)^{1/2} = \sqrt{2s} \checkmark .$$

Induktionsschritt:

$$\begin{aligned} \tilde{s}_-^{p+1} | 0 \rangle &= \tilde{s}_- \tilde{s}_-^p | 0 \rangle \\ &\stackrel{\text{I.V.}}{=} \left(\frac{p! (2s)!}{(2s-p)!} \right)^{1/2} \tilde{s}_- | p \rangle \\ &= \left(\frac{p! (2s)!}{(2s-p)!} (s(s+1) - (s-p)(s-p-1)) \right)^{1/2} | p+1 \rangle \\ &= \left(\frac{p! (2s)!}{(2s-p)!} (p+1)(2s-p) \right)^{1/2} | p+1 \rangle \\ &= \left(\frac{(p+1)! (2s)!}{(2s-p-1)!} \right)^{1/2} | p+1 \rangle \\ &= \left(\frac{(p+1)! (2s)!}{(2s-(p+1))!} \right)^{1/2} | p+1 \rangle \end{aligned}$$

■

A.2 Spin-kohärente Zustände in der Winkeldarstellung

Ausgehend von den beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} \langle y | z \rangle &= \frac{(1 + y^* z)^{2s}}{(1 + |y|^2)^s (1 + |z|^2)^s} \\ \langle y | \vec{\xi} | z \rangle &= \frac{s \langle y | z \rangle}{1 + y^* z} \begin{pmatrix} y^* + z \\ i(y^* - z) \\ 1 - y^* z \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

kann man durch die Ersetzung

$$\begin{aligned} y &\rightarrow \tan(\theta'/2) e^{i\phi'} \\ z &\rightarrow \tan(\theta/2) e^{i\phi}, \end{aligned}$$

zwischen der komplexen Darstellung und der Winkeldarstellung transformieren.

Für die Winkel-Darstellung von spin-kohärenten Zuständen gilt

$$| \theta, \phi \rangle = \sum_{p=0}^{2S} \binom{2S}{p}^{1/2} [\cos(\theta/2)]^{(2S-p)} [e^{i\phi} \sin(\theta/2)]^p | p \rangle.$$

Für den Überlapp erhält man

$$\langle \theta' \phi' | \theta \phi \rangle = \left(\cos(\theta'/2) \cos(\theta/2) + \sin(\theta'/2) \sin(\theta/2) e^{i(\phi - \phi')} \right)^{2s}.$$

Für den Spin-Vektor-Operator

$$\begin{aligned} \langle \theta' \phi' | \vec{\xi} | \theta \phi \rangle &= \frac{s \langle \theta' \phi' | \theta \phi \rangle}{1 + \tan(\theta'/2) \tan(\theta/2) e^{i(\phi - \phi')}} \\ &\times \begin{pmatrix} \tan(\theta'/2) e^{-i\phi'} + \tan(\theta/2) e^{i\phi} \\ i \left(\tan(\theta'/2) e^{-i\phi'} - \tan(\theta/2) e^{i\phi} \right) \\ 1 - \tan(\theta'/2) \tan(\theta/2) e^{i(\phi - \phi')} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Durch Einsetzen kann man leicht überprüfen

$$\begin{aligned} \langle \vec{s} \rangle &= \langle \theta\phi | \theta\phi \rangle = (\cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2))^{2s} = 1 \\ \langle \theta\phi | \vec{s} | \theta\phi \rangle &= \frac{s}{1 + \tan^2(\theta/2)} \begin{pmatrix} 2 \tan(\theta/2) \cos(\phi) \\ 2 \tan(\theta/2) \sin(\phi) \\ 1 - \tan^2(\theta/2) \end{pmatrix} \\ &= s \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} = s \vec{n}(\theta, \phi) . \end{aligned}$$

Der Betrag des Überlapps kann durch die Vektoren \vec{n} und \vec{n}' bestimmt werden

$$|\langle \theta'\phi' | \theta\phi \rangle| = \left(\frac{1 + \vec{n} \cdot \vec{n}'}{2} \right)^s .$$

Der $\mathbb{1}$ -Operator hat in der Winkeldarstellung folgende Gestalt

$$\mathbb{1} = \frac{2s+1}{4\pi} \int d\Omega |\theta, \phi\rangle \langle \theta, \phi|, \quad d\Omega = d\theta d\phi \sin(\theta) .$$

Eine sehr schöne kompakte Form findet man für den Auf- und Absteige-Operator

$$\langle \underline{s}_+ \rangle = s \sin(\theta) e^{i\phi} \quad \langle \underline{s}_- \rangle = s \sin(\theta) e^{-i\phi} .$$

A.3 Gleichverteilte Zufallszahlen für Kugelkoordinaten

Gehen wir von dem Fall aus, dass wir einen Zufallsgenerator \mathcal{G} haben, der gleichverteilte Zufallszahlen r erzeugt [18]. Unser Ziel ist es, Zufallsvektoren zu erzeugen, die gleichmäßig auf der Oberfläche einer Kugel verteilt sind. Dazu brauchen wir die Winkel θ und ϕ , mit den Wertebereichen

$$\theta \in [0, \pi] \quad \text{und} \quad \phi \in [0, 2\pi] . \quad (\text{A.2})$$

Für Kugelkoordinaten ist das Flächenelement $\sin(\theta) d\phi d\theta$ [19]. Es bietet sich an

$$f(\theta) = \frac{1}{2} \sin(\theta) \quad (\text{A.3})$$

zu wählen. Damit r gleichverteilt zwischen 0 und π liegt, muss man integrieren

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{2} \int_0^\theta \sin \theta' d\theta' = \frac{1}{2} [-\cos \theta']_0^\theta \\ &= \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) . \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Bildet man die Umkehrfunktion von Gleichung (A.4), erhält man

$$\theta = \arccos(1 - 2r) \quad . \quad (\text{A.5})$$

Damit können wir sphärisch-symmetrische Einheitsvektoren generieren, indem wir für jeden Winkel eine eigene Zufallszahl zwischen 0 und 1 erzeugen

$$\theta = \arccos(1 - 2r_\theta) \quad \text{und} \quad \phi = 2\pi r_\phi \quad . \quad (\text{A.6})$$

Gleichung (2.26) erhält man durch Einsetzen von Gleichung (A.7) in Gleichung (2.25)

$$\begin{aligned} \sum_{p=0}^{2s-1} \binom{2s}{p} (2s-p) a^p &= 2s \sum_{p=0}^{2s} \binom{2s}{p} a^p - \sum_{p=1}^{2s} \binom{2s}{p} p a^p \\ &= 2s (1+a)^{2s} - 2s a (1+a)^{2s-1} \\ &= 2s(1+a)^{2s-1} . \end{aligned}$$

A.6 Ritz'sches Variations-Prinzip:

Das Ritz'sche Variations-Prinzip ist auch bekannt als Variations-Prinzip [20]. Ist \tilde{H} selbstadjungiert und E_0 der kleinste Eigenwert, dann gilt für alle $|\psi\rangle$

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} . \quad (\text{A.9})$$

Beweis:

Man kann $|\psi\rangle$ schreiben als $|\psi\rangle = \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \psi \rangle$. Es folgt dann $\tilde{H} |\psi\rangle = \sum_n E_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \psi \rangle \geq E_0 \sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \psi \rangle$. Bildet man $\langle \psi | \tilde{H} | \psi \rangle$, erhält man Gleichung (A.9). ■

A.7 Benötigter Arbeitsspeicher

Um die Hamilton- und die Überlapp-Matrix zu berechnen, braucht man Arbeitsspeicher, dessen Größe A proportional zu d^2 ist. Die erforderliche Größe berechnet sich

$$A = 2 * d^2 * \text{sizeof}(\text{COMPLEX}) \text{ [bit]}$$

wobei

$$\text{sizeof}(\text{COMPLEX}) = \text{sizeof}(\text{double_complex}) = 2 * 64 \text{ [bit]}$$

$$1 \text{ Byte} = 8 \text{ bit}$$

$$1 \text{ kByte} = 1024 \text{ Byte}$$

$$1 \text{ MByte} = 1024 \text{ kByte}$$

daraus folgt

$$\begin{aligned} A(d) &= \frac{1}{32} d^2 \text{ [kByte]} \\ &= \frac{1}{2^{15}} d^2 \text{ [MByte]} \end{aligned}$$

Mit $d = 4096$ benötigt man also mindestens 524,3 MByte an Arbeitsspeicher und das entspricht zum Beispiel der Berechnung eines 12 Rings mit $s = 1/2$.

A.8 LAPACK++ und zhegv

Für meine numerischen Berechnungen habe ich die Programm-Bibliothek LAPACK++ ([21], [22]) benutzt. Die Bibliothek wurde von mir um die LAPACK⁴-Methode zhegv⁵ erweitert, um folgende Eigenwertgleichung zu lösen

$$\begin{aligned}\hat{A} \vec{x} &= \lambda \hat{B} \vec{x} & (A.10) \\ \hat{A}, \hat{B} &= d \times d\text{-Matrizen} \\ \vec{x} &= \text{Eigenvektor} \\ \lambda &= \text{Eigenwert} .\end{aligned}$$

\hat{A} ist die Hamiltonmatrix und \hat{B} die Überlappmatrix.

Als Resultat erhält man die Eigenwerte (aufsteigend sortiert) und optional die Matrix der Eigenvektoren, deren Spaltenvektoren die Eigenvektoren enthalten, in der Reihenfolge der Eigenwerte. Die Matrix der Eigenvektoren \hat{V} ist wie folgt normiert

$$\hat{V}^\dagger \hat{B} \hat{V} = \hat{E} , \quad (A.11)$$

wobei \hat{E} die Einheitsmatrix ist. \hat{V}^\dagger bedeutet \hat{V} adjungiert.

⁴siehe <http://www.netlib.org/lapack/>

⁵siehe <http://www.netlib.org/lapack/complex16/zhegv.f>

Literatur

- [1] SESSOLI, ROBERTA, DANTE GATTESCHI, ANDREA CANESCHI und M. A. NOVAK: *Magnetic bistability in a metal-ion cluster*. Nature, 365:141–143, 1993.
- [2] KLAUDER, JOHN R. und B.-S. SKAGERSTAM: *Coherent states*. World Scientific Publishing, Singapore, 1985.
- [3] RADCLIFF, J. M.: *Some properties of coherent spin states*. J. Phys. A: Gen. Phys., 4:313–323, 1971.
- [4] BALLENTINE, LESLIE E.: *Quantum Mechanics - A Modern Development*, Seite 541 ff. World Scientific, 1998.
- [5] MANDELGOLDT, HANS VON: *Höhere Mathematik: eine Einführung für Studierende und zum Selbststudium*, Band 2, Seite 608 ff. Stuttgart: Hirzel, 16. Auflage, 1990.
- [6] LIEB, ELLIOT H.: *The Classical limit Of Qunatum Spin Systems*. Commun. math. Phys., 31:327–340, 1973.
- [7] MERZBACH, EUGEN: *Quantum Mechanics*, Seite 146 ff. John Wiley & Sons, Inc., 3 Auflage, 1998.
- [8] SAKURAI, JUN JOHN: *Modern quantum mechanics*, Seite 20. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Rev. ed. - überarbeitete Auflage, 1994.
- [9] MENTRUP, DETLEF: *Untersuchungen zu kleinen Heisenberg-Spin-Systemen*. Diplomarbeit, University of Osnabrück, 1999. <http://www.physik.uni-osnabrueck.de/makrosysteme/>.
- [10] SCHWABL, FRANZ: *Quantenmechanik*, Seite 183. Springer, 4., verb. Auflage, 1993.
- [11] HONECKER, ANDREAS, FLORIAN MEIER, DANIEL LOSS und B. NORMAND: *Spin dynamics and coherent tunnelling in the molecular magnetic rings Fe-6 and Fe-8*. Eur. Phys. J. B, 27:487–495, 2002.
- [12] KINZEL, WOLFGANG und GEORG REENTS: *Physik per Computer - Programmierung physikalischer Probleme in Mathematica und C*, Seite 173. Heidelberg; Berlin; Oxford: Spektrum - Akad. Verl., 1996.
- [13] BÄRWINKEL, KLAUS, HEINZ-JÜRGEN SCHMIDT und JÜRGEN SCHNACK: *Structure and relevant dimension of the Heisenberg model and applications to spin rings*. J. Magn. Magn. Mater., 212:240–250, 2000.

- [14] AXENOVICH, MARIA und MARSHALL LUBAN: *Exact ground state properties of the classical Heisenberg model for giant magnetic molecules*. Phys. Rev. B, 63:100407, 2001.
- [15] SCHNACK, JÜRGEN und MARSHALL LUBAN: *Rotational modes in molecular magnets with antiferromagnetic Heisenberg exchange*. Phys. Rev. B, 63:014418, 2001.
- [16] SCHNACK, JÜRGEN, MARSHALL LUBAN und ROBERT MODLER: *Quantum rotational band model for the Heisenberg molecular magnet $\{Mo_{72}Fe_{30}\}$* . Europhys. Lett., 56:863 ff., 2001.
- [17] EXLER, MATTHIAS und JÜRGEN SCHNACK: *Evaluation of the low-lying energy spectrum of magnetic Keplerate molecules using the density-matrix renormalization group technique*. Phys. Rev. B, 67:094440, 2003.
- [18] KNUTH, D. E.: *The Art of Computer Programming*, Band I, II, III. Addison Wesley, 1973.
- [19] NEWMANN, M. E. J. und G. T. BRAKEMA: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 2. Auflage, 1999.
- [20] BALLENTINE, LESLIE E.: *Quantum Mechanics - A Modern Development*, Seite 291 ff. World Scientific, 1998.
- [21] POZO, ROLDAN und JACK DONGARRA: *LAPACK++ (version 1.1a)*. <http://math.nist.gov/lapack++/>, 2000.
- [22] DONGARRA, JACK J., ROLDAN POZO und DAVID D. WALKER: *LAPACK++: A Design Overview of Object-Oriented Extensions for High Performance Linear Algebra*. Proceedings of Supercomputing '93, IEEE Computer Society Press, Seiten 162–171, 1993.

Danksagung

Ich möchte mich bei den folgenden Personen bedanken:

PD Dr. Jürgen Schnack für die Betreuung, Referenz-Rechnungen und hilfreichen Tipps während meine Diplomarbeit. Matthias Exler für die Mithilfe im Programmieren der zhegv-Routine in LAPACK++.

Dem Deutschen Akademische Austausch Dienst, der es mir ermöglichte, für zwei Wochen das Ames Lab in Iowa (USA) zu besuchen. Prof. Dr. Marshall Luban und Dr. Christian Schröder für die Betreuung und anregenden Diskussionen während meines Aufenthalts.

Allen weiteren Mitarbeitern, Doktoranden und Diplomanden der Arbeitsgruppe Makroskopische Systeme und Quantentheorie im Fachbereich Physik der Universität Osnabrück, für die Diskussionen, insbesondere Mirko Brüger und Peter Hage.

Einen besonderen Dank gilt meinem Vater Johannes Hesmer und meiner Freundin Heike Hukriede.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig und nur mit den aufgeführten Hilfsmitteln verfasst zu haben.

Osnabrück, im September 2003