

**Elektronenspinresonanz
des eindimensionalen Spin-1/2-XXZ-Modells**

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
des Fachbereichs C - Mathematik und Naturwissenschaften
(Fachgruppe Physik)
der Bergischen Universität Wuppertal

vorgelegt von

Michael Brockmann

Juni 2012

Die Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

urn:nbn:de:hbz:468-20120816-112057-4

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3A468-20120816-112057-4>]

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Elektronenspinresonanz	7
2.1	Elektronenspinresonanz im Experiment	7
2.2	Theoretische Grundlagen	9
2.2.1	Energieabsorption von Spinsystemen	9
2.2.2	Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität	15
2.3	Definitionen der ESR-Parameter	16
2.3.1	Integrierte Intensität	17
2.3.2	Allgemeine Linienformen	17
2.3.3	Resonanzverschiebung	19
2.3.4	Linienbreite	20
2.4	Bisherige theoretische Arbeiten	22
2.4.1	Arbeiten zur Linienform	23
2.4.2	Arbeiten zu den ESR-Parametern	26
3	Eindimensionales Spin-1/2-XXZ-Modell	29
3.1	Definition der XXZ-Kette	30
3.2	Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette	32
3.2.1	Reduzierte Dichtematrix für endliche Kettenabschnitte	32
3.2.2	Massiver Bereich	34
3.2.3	Kritischer Bereich	36
4	Momentenmethode	39
4.1	Magnetfeldabhängige Momente	39
4.1.1	Definition und Berechnung	40
4.1.2	Exakte Berechnung der Momente für die XXZ-Kette	42
4.2	Frequenzabhängige Momente	46
4.2.1	Definition und Berechnung	46
4.2.2	Entwicklung für kleine Anisotropien	47
4.2.3	Hochtemperaturentwicklung für die XXZ-Kette	48
5	Numerische Berechnung der absorbierten Intensität für die XXZ-Kette	51
5.1	Numerische Methode	51
5.2	Numerische Beispielrechnungen	54
6	Linienformen für hohe Temperaturen	57
6.1	Eindimensionales Spin-1/2-XX-Modell	57
6.2	Normal-inverse Gaußverteilung als Modell für die Linienform der XXZ-Kette	58

7	Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität	63
7.1	Zerlegung der dynamischen Suszeptibilität	64
7.2	Berechnung des Zwei-Spinonen-Anteils	64
7.3	Ising-Limes	68
7.4	Isotroper Limes und integrierte Intensität	69
7.5	Linienbreite	71
7.6	Vergleich mit numerischen Rechnungen	72
8	Zusammenfassung und Ausblick	75
	Anhang	79
A	Spezialfälle	81
A.1	Paramagnet	81
A.2	SU(2)-symmetrisches Modell	81
A.3	Eindimensionales Spin-1/2-Ising-Modell im longitudinalen Magnetfeld	82
A.4	Dynamische Suszeptibilität im vollpolarisierten Grundzustand des XXZ-Modells	87
B	Technische Details zur Momentenmethode	89
B.1	Momente für allgemeine Modelle	89
B.2	Momente für die XXZ-Kette	90
B.3	Momente in h-Richtung	94
B.4	Hochtemperaturentwicklungen für die XXZ-Kette	95
B.5	Dynamische Suszeptibilität im Grenzfall unendlich hoher Temperatur	98
C	Technische Details zur Berechnung des Zwei-Spinonen Anteils	101
C.1	Gleichungen der Energien und Impulse	101
C.2	Berechnung der Matrixelemente	102
C.3	Integrierte Suszeptibilität im Ising-Limes	103
C.4	Integrierte Intensität und isotroper Limes	104
	Literaturverzeichnis	107

1 Einleitung

In der Festkörperphysik werden Eigenschaften verschiedenster Materialien und damit zusammenhängende Phänomene untersucht. Ein Beispiel, das für diese Arbeit relevant ist, stellen Materialien mit einem permanenten magnetischen Moment dar. Ihre Fähigkeit, elektromagnetische Mikrowellen zu absorbieren, wird bei der experimentellen Methode der Elektronenspinresonanz-Spektroskopie ausgenutzt. Hierbei wird die resonante Mikrowellenabsorption durch die Spins der Elektronen magnetischer Materialien gemessen, die sich in einem äußeren homogenen Magnetfeld befinden. Dieses Verfahren wurde als erstes von Zavoisky im Jahr 1944 angewendet [116].

Viele magnetische Materialien können vereinfacht als starres Kristallgitter aufgefasst werden, auf dessen Gitterplätzen Elektronen lokalisiert sind, deren Spins ein effektives magnetisches Moment verursachen. Das Phänomen der Elektronenspinresonanz (ESR) für ein solches Spinsystem beruht auf dem Zeeman-Effekt, d. h. auf der Aufspaltung der Energieniveaus in einem äußeren Magnetfeld.

Im einfachsten Fall besteht das System aus wechselwirkungsfreien Spins und wird Paramagnet genannt. Dieser absorbiert elektromagnetische Mikrowellen, sofern diese senkrecht zum Magnetfeld polarisiert sind, und deren Frequenz genau der Zeeman-Aufspaltung entspricht. Dies ist der Grund dafür, dass ESR auch als *electron paramagnetic resonance* (EPR) bezeichnet wird. Stehen die Spins in isotroper Wechselwirkung zueinander, findet Mikrowellenabsorption nach wie vor ausschließlich bei der paramagnetischen Resonanzfrequenz statt. Eine anisotrope Wechselwirkung hingegen verursacht eine qualitative Veränderung des Absorptionsspektrums. Das System kann nunmehr Mikrowellen eines ganzen Frequenzbereichs absorbieren, und die Frequenz des Absorptionsmaximums (Resonanzfrequenz) verschiebt sich. Um die Art und Stärke der anisotropen Wechselwirkung experimentell zu ermitteln, wird das Absorptionsspektrum gemessen und hieraus die Position und Breite des Absorptionsspeaks bestimmt (siehe z. B. die Übersichtsartikel [2, 56, 79] sowie Zitate darin). Die Resonanzverschiebung und Linienbreite werden im Folgenden als ESR-Parameter bezeichnet. Das volle Absorptionsspektrum wird durch die Spektralfunktion beschrieben, die für allgemeine anisotrope Wechselwirkungen bislang nicht exakt berechnet werden kann.

Die ESR-Spektroskopie stellt ein Messverfahren dar, das für Anisotropien der Spinwechselwirkung besonders sensitiv ist. Im Gegenzug bedeutet die Unempfindlichkeit gegenüber isotropen Wechselwirkungen, dass eine Störungsentwicklung der Spektralfunktion für kleine Anisotropien problematisch ist. Die Hauptschwierigkeit besteht darin, dass die niedrigste Ordnung dieser Entwicklung eine δ -Funktion beinhaltet, wohingegen die Spektralfunktion im Allgemeinen keine Singularität aufweist.

In der Literatur sind im Wesentlichen drei Ansätze zu finden, mit dieser Problematik umzugehen. Der erste beruht auf einer Störungsentwicklung, die zwar unendlich viele Summanden beinhaltet, allerdings keine systematische Näherung der Spektralfunktion darstellt. Diese Idee wurde 1954 zuerst von Kubo und Tomita verfolgt [58], die zur Summation unendlich vieler Terme eine Kumulantenentwicklung benutzten. Acht Jahre später wählten Mori und Kawasaki einen ähnlichen Zugang [77, 78], legten dabei aber eine spezielle Annahme über die Linienform der

Spektralfunktion zugrunde. Die Gültigkeit beider Ansätze ist zumindest für Systeme mit starken Quantenfluktuationen, wie sie z. B. bei eindimensionalen Spin-1/2-Modellen vorkommen, eingeschränkt. Der feldtheoretische Ansatz von Oshikawa und Affleck aus den Jahren 1997 bis 2002 basiert auf einem Selbstenergie-Formalismus [87–89]. Er ist zwar nur für tiefe Temperaturen, dafür aber für spezielle Systeme mit starken Quantenfluktuationen gültig, in denen Vielteilchen-Korrelationseffekte eine große Rolle spielen.

Der zweite Ansatz besteht darin, die Spektralfunktion und hieraus die ESR-Parameter numerisch zu bestimmen. Dies ist im Allgemeinen wegen des enormen Rechenaufwands nur für kleine Systemgrößen möglich und wurde von Cépas, El Shawish, Miyashita, Ogasahara und Yoshino in den Jahren von 1999 bis 2010 für verschiedene Modelle mit bis zu 16 Gitterplätzen durchgeführt [27, 76, 84, 85]. Die Problematik dabei ist, dass für so kleine Gittergrößen *Finite-Size*-Effekte in der Spektralfunktion eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielen, insbesondere bei tiefen Temperaturen. Dahingegen sind diese Effekte für die ESR-Parameter klein, sofern diese über die Momente der Spektralfunktion definiert werden. Im Jahr 2003 untersuchten Maeda und Oshikawa die Spektralfunktion des eindimensionalen Spin-1/2-XY-Modells mit speziellen numerischen Methoden [67]. Wegen der hohen Symmetrie dieses Modells konnten sie bis zu 400 Gitterplätze berücksichtigen. In diesem Fall sind die *Finite-Size*-Effekte selbst für die Spektralfunktion klein.

Der dritte Ansatz, die oben beschriebene Problematik zu umgehen, besteht darin, die ESR-Parameter ohne genaue Kenntnis der Spektralfunktion näherungsweise zu berechnen. Van Vleck konnte in seiner Arbeit von 1948 eine Formel für die Linienbreite bei unendlich hoher Temperatur herleiten [106] und mit seinen Resultaten den Effekt des sogenannten *exchange narrowings* beschreiben. Später wurden von Kanamori und Tachiki sowie Nagata und Tazuke Formeln für die Resonanzverschiebung angegeben [46, 81], deren Herleitungen auf speziellen Annahmen über die Dynamik des Gesamtspins beruhen. Im Jahr 2005 berechneten Maeda und Oshikawa eine Störungsentwicklung der Resonanzverschiebung für kleine Anisotropien, indem sie das lokale Maximum durch Ableiten der Spektralfunktion bestimmten [66, 68]. Hierbei trafen sie eine spezielle Annahme über die Spektralfunktion selbst. Im gleichen Jahr präsentierten Maeda, Sakai und Oshikawa eine exakte Formel für die erste Ordnung einer Störungsentwicklung der Resonanzverschiebung [69], die für eindimensionale Spin-1/2-Modelle mit anisotroper Austauschwechselwirkung gültig ist. Sie stützten ihre Resultate durch einen Vergleich mit experimentellen Daten zum antiferromagnetischen Material LiCuVO_4 . Dieses Material wurde 2001 und 2002 von Vasil'ev et al. und von Krug von Nidda et al. mittels ESR-Spektroskopie untersucht [57, 107]. Die Autoren stellten fest, dass es sich durch ein effektiv eindimensionales Modell, das sogenannte anisotrope Spin-1/2-Heisenberg-Modell, beschreiben lässt.

Eindimensionale Systeme sind aus theoretischer Sicht besonders interessant, weil in ihnen Phänomene wie die Fraktionalisierung von Spins oder Spin-Ladungs-Trennung auftreten können, die in höherdimensionalen Systemen nicht vorkommen. Zudem sind einige eindimensionale Modelle integrabel, d. h., dass das komplette Spektrum exakt berechnet werden kann. Die isotrope Spin-1/2-Heisenberg-Kette [39], auch XXX-Kette genannt, liefert hierfür ein Beispiel. Das Problem zur Bestimmung ihres Eigenwertspektrums wurde erstmals 1931 von Bethe untersucht [9]. Er konnte zeigen, dass die Eigenwerte durch sogenannte Bethe-Ansatz-Zahlen parametrisiert sind, die Lösungen eines Systems von gekoppelten algebraischen Gleichungen sind. Hierauf aufbauend konnte Hulthén 1938 den Grundzustand dieses Modells im thermodynamischen Limes durch die Lösung einer linearen Integralgleichung vollständig charakterisieren [41]. Das anisotrope Spin-1/2-Heisenberg-Modell, welches eine Verallgemeinerung der XXX-Kette darstellt und kurz als XXZ-Kette bezeichnet wird, liefert ein weiteres Beispiel für ein integrables Modell.

Aus heutiger Sicht wird der Begriff der Integrabilität etwas differenzierter aufgefasst. Ein eindimensionales quantenmechanisches Modell wird als integrabel bezeichnet, wenn zu ihm ein verallgemeinertes klassisches Vertexmodell mit einer speziellen Struktur korrespondiert. Zum Beispiel ist die XXZ-Kette mit dem sogenannten verallgemeinerten 6-Vertex-Modell verbunden. Den Vertices werden Boltzmann-Gewichte zugeordnet, mit deren Hilfe die sogenannte R-Matrix formuliert werden kann, und die sowohl von einem Spektralparameter als auch von einer Inhomogenität abhängig sind. Die R-Matrix erfüllt die fundamentale Yang-Baxter-Gleichung, weshalb die Monodromiematrizen, definiert als Produkt dieser R-Matrizen, eine Darstellung der sogenannten Yang-Baxter-Algebra bilden. Die Spur einer Monodromiematrix wird Transfermatrix genannt. Die logarithmische Ableitung einer Transfermatrix nach dem Spektralparameter lässt sich wegen der Produktstruktur der Monodromiematrix als eine Summe über lokale Operatoren schreiben. Der Zusammenhang des 6-Vertexmodells zur XXZ-Kette besteht zum Beispiel darin, dass die logarithmische Ableitung an der Stelle Null im homogenen Limes den Hamiltonoperator der XXZ-Kette liefert. Deswegen reicht die Kenntnis aller Eigenwerte der Transfermatrix, um das Spektrum des Hamiltonoperators komplett ausrechnen zu können. Die Menge aller Transfermatrizen bildet aufgrund der Yang-Baxter-Algebra eine kommutative Familie, sodass die Transfermatrix unendlich viele Erhaltungsgrößen beinhaltet. Genauere Definitionen und Details der integrablen Struktur und des algebraischen Bethe-Ansatzes sind in den Lehrbüchern [29] und [55] zu finden.

Unter Zuhilfenahme der von Klümper in den Jahren 1992 und 1993 entwickelten Methode der nichtlinearen Integralgleichungen (NLIEs) kann die Thermodynamik der XXZ-Kette im thermodynamischen Limes vollständig analytisch bestimmt werden [52, 53]. Hierbei spielt nur der größte Eigenwert der sogenannten Quantentransfermatrix eine Rolle. Über die Lösungen der NLIEs aus [52] kann dieser und damit die freie Energie des Systems für beliebige Temperaturen und Magnetfelder bestimmt werden. Außerdem können hieraus die Nachbarkorrelationsfunktionen der XXZ-Kette exakt berechnet werden.

Die Verknüpfung von ESR-Parametern mit exakten Resultaten zu Korrelationsfunktionen ist 2005 zuerst Maeda, Sakai und Oshikawa gelungen [69]. Da sich ihr Zugang auf kleine Anisotropien beschränkt, konnten sie die Resonanzverschiebung durch eine spezielle Kombination von Nachbarkorrelationsfunktionen der isotropen Spin-1/2-Heisenberg-Kette ausdrücken. So konnten sie unter Anwendung der Klümperschen Methode der NLIEs die Korrelationsfunktionen der XXX-Kette und damit die Resonanzverschiebung für beliebige Temperaturen und Magnetfelder exakt ausrechnen.

In den letzten Jahren wurde speziell am Beispiel der XXZ-Kette eine Theorie der Korrelationsfunktionen integrierbarer Modelle entwickelt. Für die vorliegende Arbeit war dabei zunächst relevant, dass Göhmann, Klümper und Seel 2004 und 2005 die bestehenden Theorien auf endliche Temperaturen und Magnetfelder im Rahmen der Quantentransfermatrix-Methode erweitern konnten [33, 34]. Im Jahr 2008 gelang es Boos, Jimbo, Miwa, Smirnov und Takeyama [16, 44], die algebraische Struktur der statischen Korrelationsfunktionen in einem sehr allgemeinen Zusammenhang vollständig aufzuklären. Ein zu [44] alternativer Beweis der Produktstruktur der inhomogenen Korrelationsfunktionen bei endlicher Temperatur mit Hilfe einer diskreten Funktionalgleichung wurde kürzlich von Aufgebauer und Klümper geführt [4]. Die in den Produkten auftauchenden Funktionen wurden von Boos und Göhmann 2009 für den allgemeinen Fall effizient durch die Lösungen linearer und nichtlinearer Integralgleichungen beschrieben [13]. Prinzipiell können hiermit alle statischen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette exakt berechnet werden, wobei für große Abstände die expliziten Ausdrücke der Korrelationsfunktionen sehr kompliziert werden können. Speziell werden in den Arbeiten von Boos et al. aus dem Jahr 2008 und von

Trippe et al. aus 2010 Beispiele für kurzreichweitige Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette gezeigt, wobei die Lösungen der NLIEs mit hoher Genauigkeit numerisch bestimmt wurden [12, 103]. In diesem Sinne sind die kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette für alle Temperaturen und Magnetfelder exakt berechenbar.

Die neuesten Entwicklungen im Bereich der oben beschriebenen algebraisch-analytischen Methoden eröffneten die Möglichkeit, sich mit der Frage auseinanderzusetzen, ob diese zur Bestimmung der ESR-Parameter benutzt werden können. In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass unter Zuhilfenahme der neuen Theorie der Korrelationsfunktionen beide ESR-Parameter der anisotropen XXZ-Kette für beliebige Anisotropien exakt berechnet werden können. Anhand dieser exakten Resultate werden dann insbesondere numerische Methoden getestet.

Das Ziel dieser Arbeit ist somit die exakte Berechnung der Resonanzverschiebung und der Linienbreite für die XXZ-Kette, ohne auf Störungsentwicklungen oder Annahmen über die Linienform der Spektralfunktion angewiesen zu sein. Damit wird ein Zusammenhang zwischen der algebraisch-analytischen Methode exakt lösbarer Modelle und der experimentellen Methode der ESR-Spektroskopie hergestellt. Ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in den Tests von numerischen Methoden und anderen Näherungen wie z. B. der sogenannten Zwei-Spinonen-Näherung [18]. Letztere wurde durch Ergebnisse zum dynamischen Strukturfaktor der XXZ-Kette von Bougourzi, Karbach und Müller aus dem Jahr 1998 motiviert [18] und basiert auf der Arbeit [43] von Jimbo und Miwa aus dem Jahr 1995. Während der Entstehung dieser Arbeit wurde außerdem die numerische Methode zur Berechnung von spektralen Größen und Korrelationsfunktionen von Weiße et al. [109–111], die in den Jahren 2004 bis 2008 entwickelt wurden, an den exakten Ergebnissen zur Resonanzverschiebung und Linienbreite getestet und verbessert.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt strukturiert. Zunächst werden in Kapitel 2 einige Grundlagen der Elektronenspinresonanz dargestellt. Hierzu wird der Versuchsaufbau eines typischen ESR-Experiments skizziert, anhand dessen die wichtigsten Begriffe und Eigenschaften der ESR-Spektroskopie erläutert werden. Danach werden die theoretischen Grundlagen der ESR in Form der Theorie der linearen Antwort eingeführt. Innerhalb dieser Theorie wird die Absorptionskurve durch die absorbierte Intensität beschrieben, für die unter anderem eine Spektraldarstellung angegeben wird. Im Anschluss daran werden verschiedene Möglichkeiten vorgestellt, die ESR-Parameter zu definieren. Der Einfluss möglicher für diese Arbeit relevanter Linienformen der Spektralfunktion wird diskutiert. Abschließend wird ein Überblick über bisherige theoretische Arbeiten zur ESR gegeben.

In Kapitel 3 wird das in dieser Arbeit betrachtete eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell eingeführt und in den physikalischen Kontext eingeordnet. Außerdem werden die zur Berechnung der statischen Korrelationsfunktionen benötigten Formeln der Arbeiten [12] und [103] dargestellt.

In Kapitel 4 werden mit Hilfe der sogenannten Momentenmethode Formeln hergeleitet, die eine exakte Berechnung der ESR-Parameter ermöglichen. Hierbei wird zwischen den magnetfeld- und frequenzabhängigen Momenten unterschieden. Im ersten Fall werden exakte Ausdrücke für die Resonanzverschiebung und Linienbreite präsentiert, die für alle Temperaturen und Magnetfelder sowie für beliebige Anisotropien der XXZ-Kette gelten. Im zweiten Fall wird neben einer Entwicklung der Resonanzverschiebung für kleine Anisotropien eine Hochtemperaturentwicklung für die Linienbreite durchgeführt. Sowohl die exakten als auch die genäherten ESR-Parameter werden mit numerischen Rechnungen verglichen.

Im ersten Teil von Kapitel 5 wird die numerische Methode von Weiße et al. vorgestellt [109–111]. Diese wird in der vorliegenden Arbeit dazu benutzt, einerseits die exakten Resultate zu untermauern, andererseits die Näherungen und Entwicklungen der frequenzabhängigen Momente

aus Kapitel 4 zu testen. Im zweiten Teil des Kapitels werden einige Beispiele zur Anwendung der numerischen Methode anhand der Spektralfunktion für verschiedene Parameterbereiche der XXZ-Kette gezeigt.

In Kapitel 6 wird das Verhalten der Spektralfunktion im Grenzfall hoher Temperaturen untersucht. Speziell für den Punkt freier Fermionen der XXZ-Kette ergibt sich mit den Resultaten von Brand und Jacoby aus dem Jahr 1976 eine exakte Vorhersage [19], die sowohl mit den exakten Resultaten aus Kapitel 4 als auch mit numerisch berechneten Daten verglichen wird. Für den generischen Fall der Anisotropie wird ein Modell für die Linienform präsentiert, das diese ziemlich gut beschreibt. Unter Zuhilfenahme dieser Modell-Linienform wird gezeigt, dass die mit einer alternativen Definition der Linienbreite berechneten Werte zu experimentellen Resultaten passen [57, 107].

Kapitel 7 widmet sich der Zwei-Spinonen-Näherung zur Berechnung der Spektralfunktion der XXZ-Kette im feldfreien Fall für verschwindende Temperatur. Diese Näherung erlaubt eine exakte Darstellung der Spektralfunktion in geschlossener Form, die in verschiedenen Grenzfällen untersucht wird. Es wird gezeigt, dass die Zwei-Spinonen-Näherung für größer werdende Anisotropien immer besser wird, bis sie schließlich im Ising-Limes das exakte Resultat liefert. Im Grenzfall kleiner Anisotropien stellt sie keine gute Näherung mehr dar. Außerdem wird sie mit numerisch berechneten Daten verglichen, die hier speziell für tiefe Temperaturen getestet werden konnten. Die breiten Absorptionspeaks der Zwei-Spinonen-Näherung zeigen, dass das anisotrope System selbst im feldfreien Fall Mikrowellen absorbiert.

Schließlich werden in Kapitel 8 die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Anwendungen der Momentenmethode zur Definition und Berechnung von ESR-Parametern gegeben.

Im ersten Kapitel des Anhangs werden spezielle Fälle untersucht, in denen die Spektralfunktion exakt zugänglich ist. Ein nichttriviales Ergebnis ergibt sich für die XXZ-Kette im Ising-Limes, das sowohl interpretiert als auch mit numerischen Daten verglichen wird. In den weiteren Kapiteln des Anhangs sind technische Details zu den einzelnen Kapiteln aufgeführt.

Einige Ergebnisse dieser Arbeit wurden bereits in den beiden Artikeln [20] und [21] veröffentlicht.

2 Grundlagen der Elektronenspinresonanz

In diesem Kapitel wird zunächst ein einfacher experimenteller Versuchsaufbau beschrieben, wobei die wichtigsten Begriffe und Eigenschaften der ESR-Spektroskopie erläutert werden. Danach werden die theoretischen Grundlagen der Elektronenspinresonanz dargestellt und die sogenannten ESR-Parameter, die das Profil der Absorptionskurve charakterisieren, definiert. Abschließend wird ein kurzer Überblick über bisherige theoretische Arbeiten im Zusammenhang mit ESR gegeben.

2.1 ESR im Experiment

In Abbildung 2.1 ist ein stark vereinfachter experimenteller Versuchsaufbau zur ESR-Spektroskopie dargestellt. Eine detailliertere Beschreibung moderner Versuchsanordnungen ist z. B. im Übersichtsartikel [79] zu finden, und in [2] werden historische Hintergründe in der Entwicklung der ESR-Spektroskopie zusammengefasst.

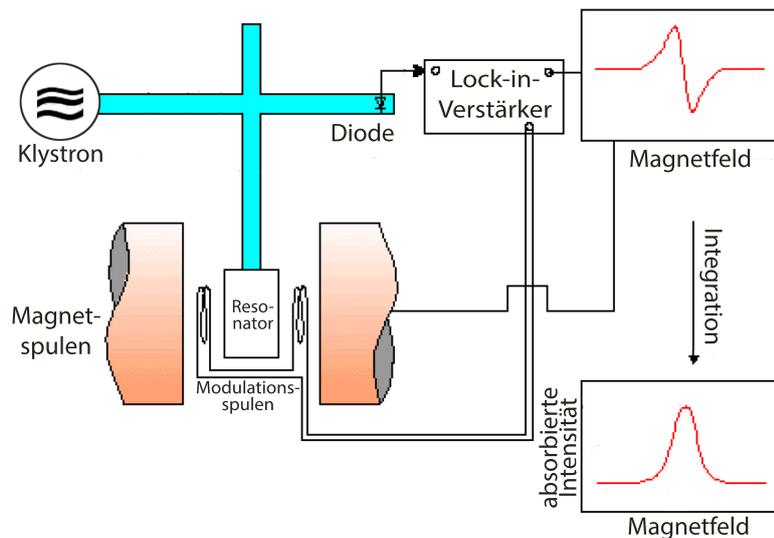


Abb. 2.1: Schematische Abbildung eines Versuchsaufbaus zur ESR-Spektroskopie (angelehnt an die Abbildung aus [40]).

Das zu untersuchende magnetische Material (Probe) befindet sich in einem Mikrowellenresonator, wobei die Mikrowellen von einem Klystron erzeugt und über einen Hohlleiter in den Resonator geleitet werden. Hierbei ist die Frequenz der Mikrowelle konstant.¹ Die Abschwächung der

¹In den Arbeiten [57, 107] wird das Material LiCuVO_4 mit einem Bruker ELEXSYS E500-CW Spektrometer mit einer Frequenz von 9.4 GHz (X-Band) untersucht.

Intensität infolge der Mikrowellenabsorption des Materials wird mit einer Diode nachgewiesen und ein entsprechendes Signal auf einen Verstärker gegeben.

Der Resonator mitsamt der Probe befindet sich zwischen zwei Magnetspulen, die ein annähernd homogenes Magnetfeld erzeugen. Die Magnetfeldstärke wird dabei adiabatisch verändert, so dass das Feld zu jedem Zeitpunkt als statisch angesehen werden kann. Auf diese Weise wird die Mikrowellenabsorption des Materials bei festgehaltener Frequenz als Funktion des Magnetfeldes gemessen.² Neuere experimentelle Methoden der ESR-Spektroskopie erlauben auch die Variation der Frequenz bei konstantem Magnetfeld [80].

In ESR-Experimenten wird typischerweise nicht die absorbierte Intensität direkt gemessen, sondern unter Benutzung der *Lock-in*-Technik ihre Ableitung (siehe Abbildung 2.1). Der Vorteil dieser Messmethode besteht darin, dass aus dem Kurvenverlauf der Ableitung das Maximum der absorbierten Intensität leicht abgelesen werden kann. So entspricht der Nulldurchgang der Ableitung genau der Position des Maximums und der Abstand der beiden Peaks links und rechts vom Nulldurchgang dem Abstand der Wendepunkte, der in der Literatur auch als *Peak-to-Peak*-Breite bezeichnet wird [57, 83]. Bei dieser Technik wird die Stärke des statischen äußeren Magnetfeldes mit Hilfe zweier Modulationsspulen moduliert, sodass alle zeitabhängigen Störungen, die nicht exakt mit der Modulationsfrequenz variieren, herausgefiltert werden können. Dies erhöht die Messempfindlichkeit um mehrere Größenordnungen.

In der ESR-Spektroskopie geht es häufig darum, die Temperaturabhängigkeit der ESR-Parameter zu messen [56]. Weiterhin sind spezielle Winkelabhängigkeiten dieser Parameter von besonderem Interesse (siehe z. B. den Übersichtsartikel [56] und Zitate darin oder die numerische Arbeit [85]). Zu ihrer experimentellen Bestimmung wird die Orientierung des äußeren Magnetfeldes bezüglich der Kristallachsen der Probe verändert. Dies kann dadurch erreicht werden, dass die Probe innerhalb des Resonators gedreht wird. Eine Veränderung der Position der Magnetspulen außerhalb des Resonators ist dagegen weniger sinnvoll, weil in der ESR-Spektroskopie meistens in der sogenannten Faraday-Konfiguration gearbeitet wird, d. h., dass die Mikrowellen senkrecht zum äußeren Magnetfeld polarisiert sind.³ Eine Drehung der Magnetspulen ist sehr aufwendig und würde diese Orientierung zueinander eventuell zerstören.

Außerdem wird in der ESR-Spektroskopie mit linear polarisierten Mikrowellen gearbeitet, wohingegen eine theoretische Beschreibung mit zirkular polarisierten Wellen oft einfacher ist. Für die dynamische Suszeptibilität, die für die Beschreibung der absorbierten Intensität nützlich ist, gilt allgemein $\chi''_{xx} + \chi''_{yy} = \frac{1}{2}(\chi''_{+-} + \chi''_{-+})$, wobei die Indizes die jeweilige Ankopplung der entsprechend polarisierten Welle an das System charakterisieren. Insbesondere gilt für ein System, das um die z -Richtung, also die Richtung der einfallenden Welle in der Faraday-Konfiguration, drehinvariant ist,

$$\chi''_{xx} = \chi''_{yy} = \frac{1}{4}(\chi''_{+-} + \chi''_{-+}). \quad (2.1)$$

In manchen theoretischen Zugängen wird nur die Funktion mit Index $+-$ bzw. $-+$ beschrieben,

²In den bisherigen theoretischen Arbeiten wird meistens die dynamische Suszeptibilität $\chi''_{\alpha\alpha}(\omega, h)$, die mit der absorbierten Intensität über die Beziehung $I(\omega, h) = \omega\chi''_{\alpha\alpha}(\omega, h)/2$ zusammenhängt (siehe Gleichung (2.27c) im nächsten Abschnitt), als Funktion der Frequenz ω für festes Magnetfeld h untersucht. Diese Diskrepanz zwischen experimenteller und theoretischer Definition der Spektralfunktion wurde in [68, 85, 89] erkannt. Da allerdings sowohl die absorbierte Intensität wegen des zusätzlichen Faktors ω als auch die Magnetfeldabhängigkeit der Funktionen deutlich schwieriger zu behandeln sind, bleibt dieser Unterschied in vielen theoretischen Zugängen unberücksichtigt.

³Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Polarisationsrichtung der Mikrowelle parallel zum Magnetfeld zu wählen. Diese Anordnung wird als Voigt-Konfiguration bezeichnet.

die im Wesentlichen für die Resonanz bei $\omega = h$ bzw. bei $\omega = -h$ verantwortlich ist, wobei mit ω die Frequenz der Mikrowelle und mit h die Stärke des äußeren Magnetfeldes bezeichnet wird.⁴ Dies entspricht der Annahme, dass die Absorptionkurve, die durch χ''_{+-} beschrieben wird, beim Maximum von χ''_{-+} vernachlässigbar klein ist, und dadurch die Linienform von χ''_{-+} nicht wesentlich beeinflusst wird. Tatsächlich lässt sich eine linear polarisierte Welle als Kombination einer rechts- und einer linkszirkular polarisierten Welle auffassen. Die beiden Spektrallinien bei $\omega = \pm h$ sind demnach ein und dieselbe, wenn entweder die rechtszirkulare Welle eine Frequenz ω oder die linkszirkulare eine Frequenz $-\omega$ besitzt. Damit ist auch klar, dass bei drehinvarianten Systemen ausschließlich Übergänge zwischen Zuständen mit einer Änderung des Gesamtspins von +1 (rechtszirkulare Welle) oder -1 (linkszirkulare Welle) vorkommen können, und dass damit in der ESR-Spektroskopie nur diese eine Rolle spielen.

2.2 Theoretische Grundlagen

In diesem Abschnitt wird mittels der Theorie der linearen Antwort [101] beschrieben, wie ein magnetisches Material innerhalb eines homogenen statischen Magnetfeldes auf ein magnetisches Wechselfeld reagiert. Dieses Wechselfeld wird in Experimenten zur Elektronenspinresonanz typischerweise durch Mikrowellenstrahlung erzeugt, dessen Wellenlänge im Millimeter- bis Zentimeterbereich liegt (siehe z. B. die Übersichtsartikel [2, 56, 79]). Somit ist die Ausdehnung des betrachteten Materials viel kleiner als die Wellenlänge des Wechselfeldes, weshalb im weiteren Verlauf davon ausgegangen wird, dass der von der Welle auf das Material übertragene Impuls vernachlässigt werden kann. Zudem wird angenommen, dass die Amplitude und damit die Intensität der eingestrahlt Mikrowelle so klein ist, dass die Kopplung der Strahlung an das System als kleine Störung betrachtet werden kann. Die Theorie der linearen Antwort liefert dann eine Näherungsformel für die absorbierte Intensität, die sowohl von der Frequenz des Wechselfeldes als auch von der Stärke des homogenen statischen Magnetfeldes sowie der Temperatur abhängt. In Anhang A wird diese Formel für einige einfache Beispiele untersucht.

Im Anschluss daran wird die für spätere Zwecke benötigte Spektraldarstellung hergeleitet.

2.2.1 Energieabsorption von Spinsystemen

Es wird nun ein System betrachtet, das aus vielen lokalisierten miteinander gekoppelten Spins besteht. Diese Spins koppeln zusätzlich noch sowohl an ein statisches homogenes Magnetfeld als auch an das magnetische Wechselfeld. Die Kopplung an das Wechselfeld wird hierbei als kleine Störung des Systems betrachtet.

Um einen Ausdruck für die absorbierte Intensität des gestörten Spinsystems zu erhalten, werden zunächst im Rahmen der Theorie der linearen Antwort thermische Erwartungswerte von Operatoren bis zur ersten Ordnung in der Störung berechnet. Die vom System absorbierte Energie hängt dann mit dem Erwartungswert des ungestörten Hamiltonoperators des Spinsystems zusammen. Die absorbierte Leistung wird als die pro Zeiteinheit absorbierte Energie definiert. Eine zeitliche Mittelung der absorbierten Leistung über eine Periode des Wechselfeldes und eine geeignete Normierung liefern schließlich die absorbierte Intensität, die mit einer dynamischen Spinkorrelationsfunktion in Zusammenhang steht.

⁴In dieser Arbeit sind die Einheiten durchgehend so gewählt, dass $g\mu_B = \hbar = k_B = 1$ gilt.

Lineare Antwort

Sei H ein Hamiltonoperator, der ein quantenmechanisches Vielteilchensystem beschreibt, und $V(t)$ eine kleine zeitabhängige Störung. Dann ist der zeitabhängige Hamiltonoperator $\mathcal{H}(t)$ des Gesamtsystems durch

$$\mathcal{H}(t) = H + V(t) \quad (2.2)$$

gegeben. Die Störung $V(t)$ soll zum Zeitpunkt t_0 eingeschaltet werden, d. h. $V(t) = 0$ für $t \leq t_0$. Für diese Zeiten befinde sich das System im Gleichgewicht und werde durch die Dichtematrix des kanonischen Ensembles beschrieben,

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} . \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnet $Z = \text{Sp}\{e^{-\beta H}\}$ die kanonische Zustandssumme des Systems und $\beta = 1/T$ die inverse Temperatur. Die Dichtematrix ρ_0 wird auch „statistischer Operator“ des Systems genannt. Ist das Spektrum des ungestörten quantenmechanischen Systems diskret mit Energien $(E_n)_{n=0}^{\infty}$ und zugehörigen Eigenzuständen $\{|n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$, so lässt sich die Dichtematrix in der Form

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n| \quad \text{mit} \quad Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad (2.4)$$

schreiben. Diese Formulierung der Dichtematrix heißt Spektraldarstellung und wird in Abschnitt 2.2.2 für die Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität benötigt.

Mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$ des Gesamthamiltonoperators $\mathcal{H}(t)$ lässt sich die Dichtematrix des zeitabhängigen Systems schreiben als

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \rho_0 U^\dagger(t, t_0) . \quad (2.5)$$

Diese genügt der von-Neumann-Differentialgleichung

$$\dot{\rho}(t) = -i [\mathcal{H}(t), \rho(t)] . \quad (2.6)$$

Die Erwartungswerte eines Operators A bezüglich der Dichtematrizen ρ_0 und $\rho(t)$ sind definiert durch

$$\langle A \rangle_0 := \langle A \rangle_{\rho_0} = \text{Sp} \{ \rho_0 A \} , \quad (2.7)$$

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp} \{ \rho(t) A \} . \quad (2.8)$$

Im Folgenden wird die Antwort des Systems auf die Störung $V(t)$ untersucht. Hierfür ist es zweckmäßig im Wechselwirkungsbild zu arbeiten. Dieses ist definiert durch eine Transformation mit dem Zeitentwicklungsoperator $U_0(t) = e^{-iHt}$,

$$A_W(t) = U_0^{-1}(t) A U_0(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} = e^{it \text{ad}_H} (A) , \quad (2.9)$$

wobei im letzten Schritt das Hadamard-Lemma

$$e^X Y e^{-X} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \text{ad}_X^k (Y) = e^{\text{ad}_X} (Y) \quad (2.10)$$

benutzt und die Schreibweise $\text{ad}_X(Y) = [X, Y]$ der adjungierten Wirkung von X eingeführt wurde. Für den zeitabhängigen Erwartungswert des Operators A gilt wegen der zyklischen Invarianz der Spur

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp} \{ \rho(t) A \} = \text{Sp} \{ \rho_W(t) A_W(t) \} = \langle A_W(t) \rangle_{\rho_W(t)}. \quad (2.11)$$

Ziel ist es nun, eine geeignete Näherung für $\rho_W(t)$ zu finden. Unter Benutzung von (2.6) und (2.9) kann die Bewegungsgleichung für ρ_W hergeleitet werden,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_W(t) &= \frac{d}{dt} (U_0^{-1} \rho(t) U_0) = i H U_0^{-1} \rho(t) U_0 - i U_0^{-1} [\mathcal{H}(t), \rho(t)] U_0 - i U_0^{-1} \rho(t) H U_0 \\ &= -i U_0^{-1} [V(t), \rho(t)] U_0 = -i [V_W(t), \rho_W(t)] \end{aligned} \quad (2.12)$$

mit der Anfangsbedingung $\rho_W(t_0) = \rho_0$. Diese ist äquivalent zu der Integralgleichung

$$\rho_W(t) = \rho_0 - i \int_{t_0}^t [V_W(t'), \rho_W(t')] dt', \quad (2.13)$$

welche iterativ gelöst werden kann. Die iterative Lösung stellt eine Entwicklung in der Störung V_W dar, die in der Theorie der linearen Antwort nach dem linearen Term abgebrochen wird,

$$\rho_W(t) = \rho_0 - i \int_{t_0}^t [V_W(t'), \rho_0] dt' + \mathcal{O}(V_W^2). \quad (2.14)$$

Der Zeitpunkt t_0 , zu dem sich das System im Gleichgewicht befindet, wird weit zurückgelegt, d. h. $t_0 \rightarrow -\infty$. Mit den Gleichungen (2.8) und (2.11) folgt damit für den zeitabhängigen Erwartungswert eines Operators A innerhalb der Näherung (2.14)

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\rho(t)} &= \text{Sp} \{ \rho_0 A_W \} - i \int_{-\infty}^t \text{Sp} \{ [V_W(t'), \rho_0] A_W(t) \} dt' \\ &= \langle A \rangle_0 - i \int_{-\infty}^t \langle [A_W(t), V_W(t')] \rangle_0 dt' \\ &= \langle A \rangle_0 - i \int_0^{\infty} \langle [A_W(t), V_W(t-t')] \rangle_0 dt', \end{aligned} \quad (2.15)$$

wobei wiederum die zyklische Invarianz der Spur ausgenutzt wurde. Die Zeitabhängigkeiten der Operatoren A_W und V_W beziehen sich sowohl auf das Wechselwirkungsbild (2.9) als auch auf die expliziten Zeitabhängigkeiten der Operatoren $A(t)$ und $V(t-t')$.

Damit wurde die Berechnung des zeitabhängigen Nichtgleichgewichts-Erwartungswertes $\langle \cdot \rangle_{\rho(t)}$ innerhalb der Theorie der linearen Antwort auf die Berechnung von zeitunabhängigen Gleichgewichts-Erwartungswerten $\langle \cdot \rangle_0$ zurückgeführt. Dass der Erwartungswert zum Zeitpunkt t nur von Störungen $V(t')$ zu Zeiten $t' < t$ abhängt, entspricht dem physikalischen Prinzip der Kausalität.

Mikrowellenabsorption

Durch den Einfluss der Störung $V(t)$, die zur Zeit $t_0 \rightarrow -\infty$ eingeschaltet wurde, wird vom System Energie absorbiert. Die Energie des Systems zum Zeitpunkt $t > t_0$ ist gegeben durch den Nichtgleichgewichts-Erwartungswert des Hamiltonoperators $\mathcal{H}(t)$,

$$E = \langle \mathcal{H}(t) \rangle_{\rho(t)} = \text{Sp} \{ \rho(t) (H + V(t)) \}. \quad (2.16)$$

Ohne Störung bliebe das System im Gleichgewicht und damit seine Energie zeitlich konstant. Daraus ergibt sich, dass die zeitliche Änderung der absorbierten Energie der zeitlichen Änderung der Gesamtenergie entspricht,

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{d}{dt} \text{Sp} \{ \rho(t) (H + V(t)) \} \\ &= \underbrace{\text{Sp} \{ \dot{\rho}(t) (H + V(t)) \}}_{= -i \text{Sp} \{ [\mathcal{H}(t), \rho(t)] \mathcal{H}(t) \} = 0} + \text{Sp} \{ \rho(t) \dot{V}(t) \} = \langle \dot{V}(t) \rangle_{\rho(t)}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Diese Größe wird als absorbierte Leistung bezeichnet. Für sie gilt innerhalb der Theorie der linearen Antwort

$$\frac{dE}{dt} = \langle \dot{V}(t) \rangle_{\rho(t)} \stackrel{(2.15)}{=} \langle \dot{V}(t) \rangle_0 - i \int_0^\infty \langle [\dot{V}_W(t), V_W(t-t')] \rangle_0 dt'. \quad (2.18)$$

Es wird nun der Spezialfall eines Spinsystems betrachtet, das einer zirkular polarisierten Welle ausgesetzt ist. Die Wellenlänge sei dabei viel größer als die Ausdehnung des Systems, sodass kein Impuls von der Welle auf das System übertragen wird. Das magnetische Wechselfeld lässt sich schreiben als

$$\mathbf{h}_r(t) = h_r \begin{pmatrix} \cos(\omega t) \\ -\sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad h_r > 0. \quad (2.19)$$

Hierbei wurde ohne Beschränkung der Allgemeinheit die x - y -Ebene als Polarisationsebene gewählt und die Phase auf Null gesetzt. Die Frequenz ω der Welle ist fest vorgegeben. Die Amplitude h_r soll hinreichend klein sein, sodass die Ankopplung des Wechselfeldes an das Spinsystem

$$V(t) = \mathbf{S} \cdot \mathbf{h}_r(t) = h_r (S^x \cos(\omega t) - S^y \sin(\omega t)) = \frac{h_r}{2} (e^{i\omega t} S^+ + e^{-i\omega t} S^-) \quad (2.20)$$

als kleine Störung des Systems betrachtet werden kann. Hierbei bezeichnen $S^\alpha = \sum_j s_j^\alpha$ mit $\alpha = x, y, z$ die Komponenten des Gesamtspins des Systems. Die Summe läuft über alle im System enthaltenen Spins mit den lokalen Spinkomponenten s_j^α . In (2.20) wurden weiterhin die Definitionen $S^\pm = S^x \pm iS^y$ benutzt. Ist der Gesamtspin in z -Richtung eine Erhaltungsgröße, d. h. $[H, S^z] = 0$, so ändern die Operatoren S^\pm wegen $[S^z, S^\pm] = \pm S^\pm$ diesen um den Wert ± 1 und werden deswegen auch Auf- und Absteiger genannt. Die Energieabsorption, die durch die Ankopplung (2.20) des magnetischen Wechselfeldes an das Spinsystem induziert wird, ist dann mit Übergängen von Zuständen des Systems verbunden, deren Gesamtspin sich um Eins unterscheidet.

Um die frequenzabhängige absorbierte Intensität zu erhalten, wird die absorbierte Leistung (2.18) über eine volle Periode $T = 2\pi/\omega$ des magnetischen Wechselfeldes gemittelt. Wird die Störung aus Gleichung (2.20) in Gleichung (2.18) eingesetzt, so verschwindet aufgrund der zeitlichen Mittelung wegen

$$\frac{1}{T} \int_0^T e^{i\omega t n} dt = \delta_{0n}, \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (2.21)$$

der erste Term, $\int_0^T \langle \dot{V}(t) \rangle_0 dt = 0$. Für den zweiten folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dE}{dt} dt &= -\frac{i}{T} \int_0^T \int_0^\infty \langle [\dot{V}_W(t), V_W(t-t')] \rangle_0 dt' dt \\ &= \frac{h_r^2 \omega}{4} \int_0^\infty \langle e^{i\omega t'} [S_W^+(t'), S_W^-(0)] - e^{-i\omega t'} [S_W^-(0), S_W^+(-t')] \rangle_0 dt' \\ &= \frac{h_r^2 \omega}{4} \int_{-\infty}^\infty e^{i\omega t} \langle [S_W^+(t), S^-] \rangle_0 dt. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Hierbei wurden im ersten Schritt zum einen die Integrationsregel (2.21) und zum anderen die Rechenregel

$$\langle [A_W(t), B_W(t-t')] \rangle_0 = \langle [A_W(0), B_W(-t')] \rangle_0 = \langle [A_W(t'), B_W(0)] \rangle_0, \quad (2.23)$$

benutzt. Letztere gilt aufgrund der zyklischen Invarianz der Spur und sorgt dafür, dass sich die t -Abhängigkeiten der Operatoren S_W^\pm im Wechselwirkungsbild gegenseitig wegheben und nur die t' -Abhängigkeit übrig bleibt. Außerdem wurde im zweiten Schritt im zweiten Term unter dem Integral t' durch $-t'$ substituiert und $S_W^-(0) = S^-$ benutzt.

Die Fähigkeit, Strahlung zu absorbieren, ist eine materialspezifische Eigenschaft. Da die Energie E des Systems und damit auch die zeitlich gemittelte absorbierte Leistung eine extensive Größe darstellt, divergiert der Ausdruck in Gleichung (2.22) im thermodynamischen Limes. Außerdem ist er proportional zur Intensität h_r^2 der Mikrowelle. Um nun eine Größe zu definieren, die im thermodynamischen Limes endlich und von der Amplitude der einfallenden Mikrowelle unabhängig ist, wird Gleichung (2.22) sowohl durch h_r^2 als auch durch die Anzahl der Gitterplätze L dividiert. Diese materialspezifische Größe wird als absorbierte Intensität bezeichnet und lautet

$$I(\omega) = \frac{1}{L h_r^2} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dE}{dt} dt = \frac{\omega}{4L} \int_{-\infty}^\infty e^{i\omega t} \langle [S_W^+(t), S^-] \rangle_0 dt. \quad (2.24)$$

Mit Hilfe der sogenannten dynamischen Suszeptibilität, oder genauer dem Imaginärteil der dynamischen Suszeptibilität pro Gitterplatz, (vergleiche hierzu die Formeln (2.1)–(2.3) in [89])

$$\chi''_{+-}(\omega) = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^\infty e^{i\omega t} \langle [S_W^+(t), S^-] \rangle_0 dt, \quad (2.25)$$

schreibt sich die absorbierte Intensität als

$$I(\omega) = \frac{\omega}{2} \chi''_{+-}(\omega). \quad (2.26)$$

Im weiteren Verlauf wird der Index W für das Wechselwirkungsbild des Operators $S_W^+(t)$ weggelassen und der Index Null an dem Erwartungswert $\langle \cdot \rangle_0$ durch einen Index T ersetzt, um die explizite Abhängigkeit von der Temperatur zum Ausdruck zu bringen.

Befindet sich ein Spinsystem mit einem materialspezifischen Hamiltonoperator H_M in einem statischen homogenen Magnetfeld \mathbf{h} , so wird die Kopplung des Feldes an das System durch den Zeeman-Term $H_Z = \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}$ im Hamiltonoperator $H = H_M + H_Z$ beschrieben. Somit hängen sowohl die Zeitentwicklung von S^+ im Wechselwirkungsbild (2.9) als auch die zeitunabhängigen thermischen Erwartungswerte (2.7),

$$S^+(t) = e^{iHt} S^+ e^{-iHt} = e^{it \text{ad}_H} (S^+), \quad (2.27a)$$

$$\langle \cdot \rangle_T = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} (\cdot) \right\} / \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} \right\}, \quad \beta = 1/T, \quad (2.27b)$$

von der Stärke $h = |\mathbf{h}|$ des statischen Magnetfeldes ab. Deshalb werden die absorbierte Intensität und die dynamische Suszeptibilität als Funktion von ω und h aufgefasst,

$$I(\omega, h) = \frac{\omega}{2} \chi''_{+-}(\omega, h), \quad (2.27c)$$

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt. \quad (2.27d)$$

Die Temperaturabhängigkeit der absorbierten Intensität ist durch die dynamische Spinkorrelationsfunktion $\langle [S^+(t), S^-] \rangle_T$ gegeben, die mit der dynamischen Suszeptibilität χ''_{+-} gemäß (2.25) über eine Fouriertransformation zusammenhängt. Die Berechnung der vollen Zeit- bzw. Frequenzabhängigkeit solcher Funktionen für beliebige Temperaturen ist im Allgemeinen nicht möglich. Nur für wenige, sehr spezielle Modelle kann die volle Frequenzabhängigkeit für beliebige Magnetfelder h und Temperaturen T berechnet werden. Drei solche Fälle sind durch den Paramagneten, das allgemeine $SU(2)$ -symmetrische Modell sowie das eindimensionale Spin-1/2-Ising-Modell gegeben.

Das Ergebnis für den Paramagneten bzw. das $SU(2)$ -symmetrische Modell wird in Anhang A.1 bzw. A.2 hergeleitet und lautet

$$I(\omega, h) = \pi h m(T, h) \delta(\omega - h). \quad (2.28)$$

Hierbei stellen $m(T, h) = \langle S^z \rangle_T / L$ die z -Komponente der Magnetisierung und der Vorfaktor $hm(T, h)$ die magnetische Energie des Systems pro Gitterplatz dar. Für den Paramagneten ergibt sich die Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit der Magnetisierung wegen $H_M = 0$ zu

$$m(T, h) = \frac{\langle S^z \rangle_T}{L} = \frac{1}{2} \operatorname{th} \left(\frac{h}{2T} \right). \quad (2.29)$$

Die δ -Funktion in Gleichung (2.28) beschreibt eine scharfe Resonanz bei der Zeeman-Energie $\omega = h$. Wechselwirkungen der Spins untereinander, wie sie in einem $SU(2)$ -symmetrischen Modell durch den Hamiltonoperator $H_M \neq 0$ mit $[H_M, S^\alpha] = 0$, $\alpha = x, y, z$, beschrieben werden, beeinflussen die paramagnetische Resonanz bei der Larmor-Frequenz $\omega = h$ nicht.⁴ Anschaulich lässt sich diese Resonanz so verstehen, dass die Magnetisierung des Modells als Ganzes um die Achse des Magnetfeldes $\mathbf{h} = -h\mathbf{e}_z$ mit der Larmor-Frequenz $\omega = h$ präzediert.

Im Spezialfall des eindimensionalen Spin-1/2-Ising-Modells ist die dynamische Suszeptibilität und damit die absorbierte Intensität durch eine Kombination von drei δ -Peaks an den Stellen $\omega = J \pm h$ und $\omega = h$ gegeben. Dies wird in Anhang A.3 gezeigt, wo auch dieses Ergebnis interpretiert und durch die sogenannten *Domain-Wall*-Anregungen des Ising-Modells erklärt wird. Die entsprechenden Vorfaktoren der δ -Funktionen sind durch spezielle Kombinationen der Nächste- und Übernächste-Nachbarkorrelationsfunktionen gegeben, deren Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeiten explizit bekannt sind, siehe Gleichung (A.18). Weiterhin wird in Anhang A.3 das Ergebnis für verschiedene Grenzfälle untersucht und mit numerischen Daten zur XXZ-Kette (3.5) mit Anisotropieparameter $\Delta = 2$ verglichen. Die für das Ising-Modell charakteristische Drei-Peak-Struktur ist schon für diesen kleinen Wert von Δ deutlich zu erkennen.

Im nächsten Abschnitt wird für den allgemeinen Fall (2.27d) die Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität hergeleitet.

2.2.2 Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität

Um die Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität zu erhalten, wird in ihrer Definition (2.27d) der thermische Erwartungswert $\langle [S^+(t), S^-] \rangle_T$ mit dem statistischen Operator (2.4) berechnet,

$$\begin{aligned}
 \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T &= \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | [S^+(t), S^-] | n \rangle \right\} \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} (\langle n | S^+(t) | m \rangle \langle m | S^- | n \rangle - \langle n | S^- | m \rangle \langle m | S^+(t) | n \rangle) \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \langle n | e^{itH} S^+ e^{-itH} | m \rangle \langle m | S^- | n \rangle \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) e^{it(E_n - E_m)} |\langle m | S^- | n \rangle|^2. \tag{2.30}
 \end{aligned}$$

Hierbei wurde im letzten Schritt benutzt, dass die Zustände $|m\rangle$ und $|n\rangle$ Eigenzustände des Hamiltonoperators H und die Operatoren S^+ und S^- zueinander hermitesch konjugiert sind. Mit Gleichung (2.30) ist die Zeitabhängigkeit von $\langle [S^+(t), S^-] \rangle_T$ explizit gegeben. Die Integration über die Zeit in (2.27d) liefert eine δ -Funktion und es folgt schließlich wegen $\beta = 1/T$ für die Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität

$$\begin{aligned}
 \chi''_{+-}(\omega, h) &= \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt \\
 &= \frac{\pi}{LZ} \sum_{m,n} (e^{-\frac{E_n}{T}} - e^{-\frac{E_m}{T}}) |\langle m | S^- | n \rangle|^2 \delta(\omega - E_m + E_n). \tag{2.31}
 \end{aligned}$$

Das Energiespektrum $\{E_n\}_{n=0}^{\infty}$ besteht hierbei aus den Eigenwerten des gesamten Hamiltonoperators $H = H_M + H_Z$, die wegen des Zeeman-Terms $H_Z = -hS^z$ vom Magnetfeld abhängig sind. Die Temperaturabhängigkeit der dynamischen Suszeptibilität ist in ihrer Spektraldarstellung durch die Boltzmann-Faktoren $e^{-E_n/T}$ gegeben. Für $T \rightarrow 0$ wird aus dieser Spektraldarstellung

$$\chi''_{+-}(\omega, h) \rightarrow \frac{\pi}{Ln_g} \sum_{n,g} \{ |\langle n | S^- | g \rangle|^2 \delta(\omega - E_n + E_g) - |\langle g | S^- | n \rangle|^2 \delta(\omega - E_g + E_n) \}, \tag{2.32}$$

wobei über die n_g -fach entarteten Grundzustände $|g\rangle$ gemittelt wird.

Die Spektraldarstellung (2.31) erleichtert es, einige wichtige Eigenschaften der absorbierten Intensität zu verstehen. Für $\omega > 0$ sind wegen der δ -Funktionen die einzigen nichtverschwindenden Terme diejenigen mit $E_m > E_n$, und diese sind aufgrund des Faktors $e^{-\frac{E_n}{T}} - e^{-\frac{E_m}{T}}$ positiv. Für $\omega < 0$ gilt entsprechend, dass die einzigen nichtverschwindenden Terme negativ sind. Damit folgt, dass die absorbierte Intensität $I(\omega) = \omega \chi''_{+-}(\omega)/2$ für alle Frequenzen ω nicht negativ ist.

Aus der Spektraldarstellung folgt weiter das sogenannte Fluktuations-Dissipations-Theorem

$$\begin{aligned}
 \chi''_{+-}(\omega, h) &= \frac{\pi}{LZ} (1 - e^{-\frac{\omega}{T}}) \sum_{m,n} e^{-\frac{E_n}{T}} |\langle m | S^- | n \rangle|^2 \delta(\omega - E_m + E_n) \\
 &= \frac{1}{2L} (1 - e^{-\frac{\omega}{T}}) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle S^+(t) S^- \rangle_T dt, \tag{2.33}
 \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt eine zu (2.30) analoge Rechnung, nur in umgekehrter Reihenfolge, durchgeführt wurde. Wird Gleichung (2.33) durch $(1 - e^{-\frac{\omega}{T}})$ dividiert und über alle Frequenzen integriert, so folgt die Summenregel

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''_{+-}(\omega, h)}{1 - e^{-\frac{\omega}{T}}} d\omega = \frac{1}{2L} \langle S^+ S^- \rangle_T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \langle s_1^+ s_j^- \rangle_T. \quad (2.34)$$

Da die Korrelationsfunktion $\langle s_1^+ s_j^- \rangle_T$ mit wachsendem j exponentiell abfällt, liefert die Summe im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ einen endlichen Wert und folglich existiert das Integral auf der linken Seite der Gleichung (2.34) in diesem Limes. Wenn also für festes Magnetfeld h und beliebige Temperatur $T > 0$ die dynamische Suszeptibilität $\chi''_{+-}(\omega, h)$ als Funktion von ω im thermodynamischen Limes hinreichend glatt ist und in eine Taylorreihe um $\omega = 0$ entwickelt werden kann, so muss der konstante Term dieser Reihe gleich Null sein. Damit besitzt die absorbierte Intensität $I(\omega) = \omega \chi''_{+-}(\omega)/2$ eine doppelte Nullstelle bei $\omega = 0$. Da außerdem in Abschnitt 4.1.1 gezeigt wird, dass $I(\omega) \rightarrow 0$ für $\omega \rightarrow \pm\infty$, besitzt die absorbierte Intensität mindestens zwei lokale Maxima. Dies ist beispielsweise für die absorbierte Intensität der XX-Kette bei unendlich hoher Temperatur in Abbildung 6.1 gut zu erkennen.

Aus der Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität konnten einige wichtige Eigenschaften des Absorptionsprofils im thermodynamischen Limes gefolgert werden. Die Bestimmung der exakten Linienform der absorbierten Intensität $I(\omega, h)$ ist jedoch auch hiermit für den allgemeinen Fall nicht möglich. Im thermodynamischen Limes wird der Zustandsraum des Quantenspinsystems unendlich dimensional und die absorbierte Intensität in der Spektraldarstellung zu einer Summe unendlich vieler beliebig dicht liegender δ -Funktionen. Selbst für den speziellen Fall des eindimensionalen Spin-1/2-XXZ-Modells konnte die genaue Linienform bislang nicht bestimmt werden.

Stattdessen werden im folgenden Abschnitt einige Parameter des Absorptionsprofils und weitere Eigenschaften der absorbierten Intensität definiert und im weiteren Verlauf dieser Arbeit untersucht. Hierbei richtet sich das Hauptaugenmerk auf das eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell, das in Kapitel 3 genauer beschrieben wird, obwohl die in Kapitel 4 betrachtete Momentenmethode prinzipiell auch auf allgemeinere und höherdimensionale Systeme angewendet werden kann.

2.3 Definitionen der ESR-Parameter

Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, ist die absorbierte Intensität $I(\omega, h)$ für alle Frequenzen ω , Magnetfelder h und Temperaturen T nicht negativ. Falls das Integral von $I(\omega, h)$ über alle reellen Werte von ω bzw. h existiert, kann die absorbierte Intensität normiert und die daraus resultierende Funktion als Dichte einer Verteilung von ω bzw. h interpretiert werden. Im Folgenden wird diese Dichtefunktion mit $f(x)$ bezeichnet, wobei hier die Variable x für die Frequenz ω bzw. das Magnetfeld h steht.

Zunächst wird im ersten Abschnitt die integrierte Intensität, also das Normierungsintegral, definiert und dessen Existenz diskutiert. Im darauffolgenden Abschnitt werden verschiedene Eigenschaften der Linienform von Dichtefunktionen vorgestellt, die für die vorliegende Arbeit relevant sind. Abschließend werden einige Parameter definiert, die unter dem Begriff „ESR-Parameter“ zusammengefasst und in späteren Kapiteln speziell für das eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell untersucht werden. Der Einfluss der Linienform auf die Interpretation der ESR-Parameter wird erörtert.

2.3.1 Integrierte Intensität

Für ein festes homogenes Magnetfeld h wird die absorbierte Intensität $I(\omega, h)$ als Funktion der Frequenz ω aufgefasst. Die integrierte Intensität wird definiert als das Integral

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega, h) d\omega, \quad (2.35)$$

das weiter vereinfacht werden kann. Es werden zunächst die Definitionen der absorbierten Intensität (2.27c) und der dynamischen Suszeptibilität (2.27d) eingesetzt. Danach wird eine partielle Integration durchgeführt, wobei angenommen wird, dass der Oberflächenterm verschwindet. Zuletzt werden die Integrationen über ω und t explizit ausgeführt,

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega}{4L} \int_{-\infty}^{\infty} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T e^{i\omega t} dt d\omega = \frac{1}{4L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T (-i\partial_t) e^{i\omega t} dt d\omega \\ &= \frac{1}{4L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} (i\partial_t) \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt d\omega = \frac{1}{4L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [[S^+(t), H], S^-] \rangle_T d\omega dt \\ &= \frac{\pi}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) \langle [[S^+(t), H], S^-] \rangle_T dt = \frac{\pi}{2L} \langle [[S^+, H], S^-] \rangle_T. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Die integrierte Intensität ist somit durch die statische Korrelationsfunktion $\langle [[S^+, H], S^-] \rangle_T$ gegeben, die über den thermischen Erwartungswert $\langle \cdot \rangle_T$ und den Zeeman-Term $H_Z = -hS^z$ in $H = H_M + H_Z$ von der Stärke des homogenen Magnetfeldes h abhängt. Mit Gleichung (2.36) ist auch gezeigt, dass das Normierungsintegral I_0 für die absorbierte Intensität als Funktion von ω im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ existiert.

In ESR-Experimenten liegt häufig der Fall vor, dass die Frequenz ω der eingestrahlten Mikrowelle festgehalten und dass das Magnetfeld h variiert wird. In diesem Fall wird die absorbierte Intensität $I(\omega, h)$ als Funktion von h aufgefasst und die integrierte Intensität durch

$$\tilde{I}_0 = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega, h) dh \quad (2.37)$$

definiert [104]. Die Existenz dieses Integrals ist *a priori* nicht sicher gestellt. Für das eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell werden jedoch in den Abschnitten 4.2.2 und 4.2.3 einige Grenzfälle untersucht, in denen explizite Ausdrücke für \tilde{I}_0 hergeleitet werden.

2.3.2 Allgemeine Linienformen

Sei f die Dichtefunktion einer Verteilung. Dann ist $f(x)$ positiv für alle reellen Zahlen x und normiert, d. h. $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$. Hieraus folgt, dass $f(x)$ für $x \rightarrow \pm\infty$ hinreichend schnell auf Null abfallen muss. Ansonsten kann die Form der Kurve $f(x)$ beliebig sein. Integrale der Form $\int_a^b f(x) dx$ werden als spektrales Gewicht des Intervalls (a, b) bezeichnet. Die Randbereiche einer Verteilung, in denen die Dichte f gegen Null geht, werden Schwänze oder auch *tails* genannt.

Eine besonders einfache Form liegt vor, wenn die Dichte ein einziges lokales Maximum besitzt. Das bedeutet, dass sie aus einem einzigen mehr oder weniger breiten Peak besteht, dessen Umgebung den größten Teil des spektralen Gewichts ausmacht. Eine solche Verteilung wird „unimodal“ genannt. Eine Verteilung, deren Dichte mehrere lokale Maxima besitzt, heißt „multimodal“.

Falls sich jedoch der Großteil des spektralen Gewichts einer multimodalen Verteilung in einem einzigen Peak vereint, wird diese auch „näherungsweise unimodal“ genannt. Ein Beispiel für eine solche Verteilung stellt die grüne Kurve in Abbildung 6.1 dar. Der Begriff „multimodal“ wird im Folgenden nur für Verteilungen verwendet, deren spektrales Gewicht sich auf zwei, drei oder mehr Peaks mehr oder weniger gleichmäßig verteilt. Diese werden dann bi-, tri- oder multimodal genannt. Beispiele für bi- oder trimodale Verteilungen stellen die Funktionen I oder ϕ des eindimensionalen Spin-1/2-Ising-Modells aus den Gleichungen (A.24b) und (A.27) dar (siehe hierzu auch Abbildung A.1). Eine weitere, nichttriviale bimodale Verteilung ist durch das eindimensionale Spin-1/2-XY-Modell sowohl bei hohen als auch bei tiefen Temperaturen gegeben (siehe Abbildungen 6.1 und 5.2). Multimodale Verteilungen mit mehreren Peaks kommen beispielsweise bei Modellen vor, in denen selbst die z -Komponente des Gesamtspins nicht erhalten ist und deswegen sogenannte „Satelliten-Peaks“ im Absorptionsspektrum auftauchen [106].

Eine Sonderrolle nehmen wiederum multimodale Verteilungen ein, die aus sehr vielen, dicht nebeneinander liegenden scharfen Peaks bestehen, so wie es theoretisch für jede absorbierte Intensität eines endlichen Systems der Fall ist. Falls durch minimales Aufweiten dieser vielen scharfen Peaks eine Struktur mit einem einzigen Hauptpeak entsteht, so werden diese Verteilungen wieder näherungsweise unimodal genannt, wie z. B. die roten Kurven in den Abbildungen 7.4 und 7.5.

Ein extremes Beispiel für eine unimodale Verteilung ist in Anhang A.2 mit dem $SU(2)$ -symmetrischen Modell gegeben. Die zugehörige Dichtefunktion besteht aus einem einzigen, unendlich scharfen Peak, dargestellt durch die δ -Funktion $\delta(\omega - h)$. Für kleine Abweichungen von einem $SU(2)$ -symmetrischen Modell, wie sie zum Beispiel durch die XXZ-Kette (3.5) in der Nähe des isotropen Punktes $\Delta = 1$ realisiert werden, verschiebt und verbreitert sich diese scharfe Resonanz. Der Hauptteil des spektralen Gewichts liegt nach wie vor in dem Peak bei $\omega \approx h > 0$, allerdings wurde in Abschnitt 2.2.2 gezeigt, dass die absorbierte Intensität als Funktion der Frequenz ω ein weiteres lokales Maximum für $\omega < 0$ besitzt. Die Verteilung ist demnach nur näherungsweise unimodal, was die numerischen Rechnungen aus Abschnitt 5.2 bestätigen. Diese zeigen weiterhin, dass die absorbierte Intensität als Funktion des Magnetfeldes h für spezielle Parameterbereiche von T , ω und Δ unimodal ist.

Bevor in den nächsten beiden Abschnitten verschiedene Maße für die im letzten Absatz beschriebene Verschiebung und Verbreiterung der Resonanzkurve diskutiert werden, werden noch weitere Eigenschaften der Dichtefunktion betrachtet. Es kann beispielsweise vorkommen, dass das spektrale Gewicht $\int_a^\infty f(x)dx$ eines Schwanzes einen großen Beitrag zum Gesamtgewicht liefert, obwohl die Dichte $f(x)$ für $x > a$ schon stark auf Null abgefallen ist. Solche Schwänze werden *heavy tails* genannt. Ein extremes Beispiel ist durch die Cauchy-Lorentz-Verteilung (A.28) gegeben. Weiter kann der Peak einer unimodalen Verteilung asymmetrisch sein, was die Definition der genauen Peakposition erschwert. Der in Abschnitt 7.2 berechnete Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität der massiven XXZ-Kette für $T = h = 0$ liefert hierfür ein Beispiel (siehe Abbildung 7.1). Liegt bei einer unimodalen Verteilung viel Gewicht in dem Übergang vom Maximum zu ihren Schwänzen, wird dieses mit „Gewicht in den Flügeln“ bezeichnet [27]. Dies kann unter anderem zur Folge haben, dass die Wendepunkte nah beieinander liegen und damit ihr Abstand keine sinnvolle Definition für die Linienbreite darstellt. Ein Beispiel für eine solche Kurvenform liefert die absorbierte Intensität der XXZ-Kette für hohe Temperaturen und nahe des isotropen Punktes ($\delta = -0.1$), die in den Abbildungen 5.3 und 6.2 dargestellt ist.

2.3.3 Resonanzverschiebung

Als Resonanzverschiebung wird die Differenz aus der Position des Resonanzpeaks der absorbierten Intensität $I(\omega, h)$ und dem Magnetfeld h bzw. der Frequenz ω bezeichnet. Es muss also die Position des Hauptpeaks dieser als (näherungsweise) unimodal angenommenen Verteilung bestimmt werden.

Für eine unimodale Verteilung gibt es verschiedene Möglichkeiten, die Position x_0 ihres Peaks zu definieren. Eine davon besteht zum Beispiel darin, das lokale Maximum von f zu benutzen,

$$\partial_x f(x)|_{x=x_0} = 0 \quad \text{mit} \quad \partial_x^2 f(x)|_{x=x_0} < 0, \quad (2.38)$$

wobei davon ausgegangen wird, dass f hinreichend oft lokal differenzierbar ist. Üblicherweise wird diese Definition der Peakposition in ESR-Experimenten benutzt (siehe z. B. Abschnitt 2.1 oder den Übersichtsartikel [2] und Zitate darin).

Eine weitere Möglichkeit für die Definition von x_0 stellt der Median dar [38],

$$\int_{-\infty}^{x_0} f(x) dx = \int_{x_0}^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{2}, \quad (2.39)$$

wobei benutzt wird, dass f als Verteilung integrierbar ist. Diese Definition ist robuster gegenüber vertauschten Daten. Allerdings ist die experimentelle Bestimmung des Medians x_0 schwierig, wenn der Untergrund der gemessenen Daten nicht von den Schwänzen der Verteilung unterschieden werden kann. Dieses Problem gilt ganz allgemein für alle Definitionen, die Integrale über die Schwänze der Verteilung beinhalten, und es wird besonders deutlich, wenn die Verteilung *heavy tails* besitzt.

Eine dritte Möglichkeit zur Definition der Peakposition x_0 einer unimodalen Verteilung ist durch ihr erstes Moment, d. h. den Mittelwert von f , gegeben,

$$x_0 = \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx. \quad (2.40)$$

In der vorliegenden Arbeit wird hauptsächlich diese dritte Definition verwendet, wobei stets davon ausgegangen wird, dass die Verteilungsfunktion f hinreichend schnell abfällt, sodass das Integral in Definition (2.40) existiert.

Für unimodale Verteilungen, die zu ihrem Maximum symmetrisch sind, liefern alle drei Definitionen (2.38)–(2.40) den gleichen Wert von x_0 . Für multimodale oder näherungsweise unimodale Verteilungen ist die Definition des lokalen Maximums nicht eindeutig, weil Gleichung (2.38) mehr als eine Lösung besitzt. Die beiden anderen Definitionen sind zwar eindeutig, die Interpretation als Peakposition ist aber nur noch bedingt sinnvoll.

Für asymmetrische Verteilungen können die Definitionen (2.38)–(2.40) unterschiedliche Werte liefern. Besitzt beispielsweise eine unimodale Verteilung deutlich mehr Gewicht in ihrem rechten als in ihrem linken Flügel, ist das lokale Maximum kleiner als der Median, der wiederum kleiner als der Mittelwert ist. Diese Situation liegt in dem Fall der massiven Spin-1/2-XXZ-Kette für $T = h = 0$ vor und ist in Abbildung 7.5 veranschaulicht.

Der Vorteil des lokalen Maximums besteht darin, dass dieser Wert experimentell leicht zugänglich ist. Da in ESR-Experimenten üblicherweise mit Hilfe der sogenannten *Lock-in*-Technik die Ableitung der Absorptionskurve gemessen wird, muss das Maximum nur noch als Nulldurchgang abgelesen werden (siehe Abschnitt 2.1). Hierbei und für numerisch berechnete Dichten f besteht

allerdings das Problem, dass bei stark verrauschten Signalen der Nulldurchgang nicht eindeutig bestimmt werden kann.

Diese Vor- und Nachteile der unterschiedlichen Maße für die Peakposition werden bei den verschiedenen Definitionen der Linienbreite noch deutlicher.

2.3.4 Linienbreite

Analog zur Resonanzverschiebung gibt es für die Definition der Linienbreite einer unimodalen Verteilung mehrere Möglichkeiten, die je nach Linienform ein mehr oder weniger intuitives Maß hierfür liefern.

Eine in der Literatur zu ESR häufig benutzte Definition der Linienbreite ist die sogenannte *Peak-to-Peak*-Breite (siehe z. B. Abschnitt 2.1 oder die Arbeit [56] und Zitate darin). Als Maß für die Breite wird der Abstand zwischen dem Maximum rechts und dem Minimum links vom Nulldurchgang der Ableitung der Absorptionskurve verwendet. Auf die Dichtefunktion f einer unimodalen Verteilung übertragen, bedeutet dieser Wert den Abstand der beiden Wendepunkte x_l und x_r links und rechts vom Maximum. Die Wendepunkte sind über

$$\partial_x^2 f(x)|_{x=x_{l,r}} = 0 \quad \text{mit} \quad \partial_x^3 f(x)|_{x=x_{l,r}} \neq 0 \quad (2.41a)$$

definiert, wobei wieder davon ausgegangen wird, dass f hinreichend oft lokal differenzierbar ist. Die *Peak-to-Peak*-Breite (ptp) ist dann gegeben durch

$$\Delta_{\text{ptp}}x = x_r - x_l. \quad (2.41b)$$

Der Vorteil dieser Größe besteht darin, dass sie sich, wie bereits erwähnt, aus den experimentellen Daten leicht bestimmen lässt. Falls diese jedoch stark verrauscht sind, muss eine geeignete Familie von Verteilungen gewählt und eine Anpassung der Parameter vorgenommen werden. Das bedeutet allerdings, dass über die Linienform eine Annahme getroffen wird, die nicht immer zutreffen muss. Außerdem gibt es Verteilungen, bei denen aufgrund von Gewichten in den Flügeln der Abstand der Wendepunkte sehr klein bzw. nicht eindeutig ist [27]. In diesem Fall stellt die Definition (2.41) der *Peak-to-Peak*-Breite kein intuitives bzw. wohldefiniertes Maß für die Linienbreite dar (siehe Abbildung 5.3). Für verrauschte numerische Daten ist die Bestimmung der höheren Ableitungen schwierig. Weiterhin ist die Definition der *Peak-to-Peak*-Breite für multimodale Verteilungen nicht eindeutig. Die beiden folgenden Definitionen umgehen diese Probleme, indem sie Integrale über die Dichtefunktion f benutzen.

Das zum Median als Peakposition analoge Maß für die Peakbreite stellt der sogenannte Quartilsabstand (*interquartile range*, iqr) dar [38]. Dieser ist definiert als die Differenz zweier Werte x_l und x_r ,

$$\Delta_{\text{iqr}}x = x_r - x_l, \quad (2.42a)$$

die über die beiden Integrale

$$\int_{-\infty}^{x_l} f(x)dx = \int_{x_r}^{\infty} f(x)dx = \frac{1}{4} \quad (2.42b)$$

festgelegt sind.

Tab. 2.1: Auflistung verschiedener Linienbreiten für einige symmetrische Standardverteilungen. Mit $\Delta_{\text{hh}}x$ wird die Breite bei halber Höhe bezeichnet.

Verteilung	Dichtefunktion	$2\Delta_{\text{msd}}x$	$\Delta_{\text{iqr}}x$	$\Delta_{\text{hh}}x$	$\Delta_{\text{ptp}}x$
Cauchy-Lorentz	$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2}$	∞	2η	2η	$\frac{2\eta}{\sqrt{3}}$
Gauß	$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$	2σ	$\approx 1.34\sigma$	$\sqrt{8 \ln 2} \sigma$	2σ
Rechteck	$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2a}, & -a < x < a \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$	$\frac{2a}{\sqrt{3}}$	a	$2a$	$(2a)$

Eine andere Möglichkeit, die Breite einer unimodalen Verteilung über Integrale zu definieren, bieten die Momente. Hierbei wird die Breite als Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung (*mean square deviation*, msd) der Dichtefunktion f definiert,

$$\Delta_{\text{msd}}x = \sqrt{\Delta x^2} \quad \text{mit} \quad (2.43a)$$

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx - \left(\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx \right)^2. \quad (2.43b)$$

Ein Beispiel, das den Unterschied der Linienbreiten zeigt, ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Die Bestimmung der Linienbreiten $\Delta_{\text{iqr}}x$ und $\Delta_{\text{msd}}x$ aus experimentellen Daten sollte prinzipiell möglich sein, kann aber wegen des Untergrunds unter Umständen problematisch werden. Ein großer Vorteil dieser Definitionen besteht darin, dass keine Annahme über die Linienform getroffen werden muss.

In den Definitionen (2.42) und (2.43) geht das Gewicht der Schwänze ein. Für Verteilungen mit *heavy tails* kann somit die mittlere quadratische Abweichung sehr groß werden oder sogar divergieren, wie es z. B. für die Cauchy-Lorentz-Verteilung (A.28) der Fall ist (siehe Tabelle 2.1). Dahingegen liefern die beiden anderen Definitionen der Breite endliche Werte. Dieser Aspekt zeigt deutlich, dass die Breite einer unimodalen Verteilung von der Wahl ihrer Definition abhängt, je nachdem wie stark das Gewicht der Schwänze berücksichtigt werden soll.

In dieser Arbeit wird, wenn nicht anders angegeben, die mittlere quadratische Abweichung als Definition der Linienbreite gewählt. Diese ist beispielsweise in der Quantenmechanik das übliche Maß für die Breite von Wellenpaketen [60].

Für eine Gaußverteilung liefern alle drei Definitionen (2.41)–(2.43) der Linienbreite Werte, die sich nur um konstante Faktoren unterscheiden und die allesamt ein intuitives Maß liefern (siehe Tabelle 2.1). Für *heavy-tailed* Verteilungen ist dies nicht länger der Fall und die Breite $\Delta_{\text{msd}}x$ weicht deutlich von den typischen, in Experimenten benutzten Maßen (ptp, Breite bei halber Höhe) ab. Die Cauchy-Lorentz-Verteilung aus Tabelle 2.1 liefert hierfür ein extremes Beispiel.

Ähnliche Differenzen in der Linienbreite ergeben sich für näherungsweise unimodale Verteilungen, speziell wenn sogenannte Satelliten-Peaks vorkommen. Diese zusätzlichen kleinen Peaks zeichnen sich dadurch aus, dass sie weit außen liegen. Sie tauchen beispielsweise bei großen Magnetfeldern in der Absorptionskurve von $SU(2)$ -symmetrischen Modellen auf, deren Symmetrie durch eine kleine Störung gebrochen ist und die nicht $U(1)$ -symmetrisch sind (vergleiche z. B. die

Diskussionen in [66, 106]). Während beim Quartilsabstand nur das spektrale Gewicht dieser kleinen Peaks zählt, spielt in der Definition der mittleren quadratischen Abweichung (2.43b) auch ihre Lage eine wichtige Rolle. Je weiter ein Satellitenpeak vom Hauptpeak entfernt liegt, desto größer wird wegen des Faktors x^2 die mittlere quadratische Abweichung. Somit lässt sich diese nicht mehr ohne Weiteres als Breite des Hauptpeaks interpretieren, wohingegen der Quartilsabstand ein gegenüber der Position des Satellitenpeaks robustes Maß hierfür darstellt.

Weiterhin ist die mathematisch exakte Berechnung der Dichtefunktion f als normierte absorbierte Intensität im Allgemeinen nicht möglich. Auf den ersten Blick scheinen somit die ESR-Parameter (2.38)–(2.40) und (2.41)–(2.43) nicht zugänglich zu sein. Es zeigt sich aber in Kapitel 4, dass die ESR-Parameter, definiert über die Momente der Verteilung, d. h. die Resonanzverschiebung als Mittelwert (2.40) und die Linienbreite als Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung (2.43b), durch Spin-Korrelationsfunktionen ausgedrückt werden können. In dem Spezialfall des eindimensionalen Spin-1/2-XXZ-Modells, welches in Kapitel 3 vorgestellt wird, können diese und damit die ESR-Parameter exakt berechnet werden. Die Kenntnis der Dichtefunktion bzw. der absorbierten Intensität ist hierfür nicht erforderlich, was bedeutet, dass auch keine Annahme über die Linienform getroffen werden muss.

2.4 Bisherige theoretische Arbeiten

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über frühere theoretische Arbeiten gegeben, in denen die absorbierte Intensität und die im vorherigen Abschnitt definierten ESR-Parameter in gewissen Grenzfällen untersucht wurden. Hierbei werden diese Arbeiten wie in [66] klassifiziert. Die erste Klasse umfasst Arbeiten, die die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} bzw. $\chi''_{\alpha\alpha}$ direkt analysieren, wohingegen die zweite aus Arbeiten besteht, die sich ausschließlich mit der Berechnung der ESR-Parameter beschäftigen.

Wie in Anhang A.1 und A.2 beschrieben, bleibt die paramagnetische Resonanz wechselwirkungsfreier lokaler Spins bei $\omega = h$ erhalten, wenn eine $SU(2)$ -symmetrische Wechselwirkung zwischen den Spins vorhanden ist. Die absorbierte Intensität ist in diesem Fall durch eine δ -Funktion gegeben, $I(\omega) \sim \delta(\omega - h)$. Für kleine Störungen des $SU(2)$ -symmetrischen Modells verbreitert und verschiebt sich die Resonanzkurve, und die Resonanzverschiebung kann in der kleinen Störung entwickelt werden, ohne die exakte Linienform zu kennen. Dieser Zugang wurde auf verschiedene Weisen von van Vleck [106], Kanamori und Tachiki [46], Nagata und Tazuke [81] sowie von Maeda, Sakai und Oshikawa [66, 68, 69] behandelt.

Dahingegen scheint eine direkte Entwicklung der absorbierten Intensität unmöglich, weil die nullte Ordnung eine δ -Funktion beinhaltet, jedoch die verschobene und verbreiterte Absorptionskurve in der Regel keine singulären Stellen aufweist. Dies zeigt deutlich, dass für eine Entwicklung der absorbierten Intensität bzw. der dynamischen Suszeptibilität nur Zugänge in Frage kommen, die in der Störungsentwicklung unendlich viele Terme berücksichtigen. Hierzu gibt es sowohl die traditionellen Standardzugänge von Kubo und Tomita [58] sowie von Mori und Kawasaki [77, 78], als auch den neueren, feldtheoretischen Zugang von Oshikawa und Affleck [86–89].

In den Arbeiten [27, 76, 84, 85] von Miyashita et al. sowie der Arbeit [67] von Maeda und Oshikawa werden sowohl die dynamische Suszeptibilität als auch die ESR-Parameter für endliche Systeme numerisch berechnet.

In der Arbeit [19] von Brandt und Jacoby wird die transversale dynamische Korrelationsfunktion für das eindimensionale Spin-1/2-XX-Modell im Limes unendlich hoher Temperatur exakt

berechnet und ist durch eine Gaußfunktion gegeben, $\langle \sigma_m^x(t) \sigma_n^x \rangle = \delta_{m,n} \cos(ht) e^{-t^2/J^2}$. Die absorbierte Intensität wird hieraus durch Fouriertransformation bestimmt. Dieses exakte Ergebnis wird im Zusammenhang mit der Linienbreite der Absorptionskurve in Abschnitt 6.1 diskutiert.

In allen Zugängen, die statt der absorbierten Intensität I die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} bzw. χ''_{xx} betrachten, steckt die Näherung, dass die ESR-Parameter der absorbierten Intensität $I(\omega) = \omega \chi''_{+-}(\omega)/2$ durch die entsprechenden Parameter der dynamischen Suszeptibilität χ''_{+-} approximiert werden können. In dieser Näherung bleibt also der Faktor ω unberücksichtigt, was z. B. für sehr kleine Anisotropien und daraus resultierende sehr schmale Resonanzpeaks gerechtfertigt ist. Für breitere Resonanzkurven ist diese Näherung nicht mehr zulässig.

2.4.1 Arbeiten zur Linienform

Kubo-Tomita- und Mori-Kawasaki-Theorie

Kubo und Tomita betrachten in ihrer Arbeit [58] den Grenzfall hoher Temperaturen. Die dynamische Suszeptibilität aus [58] lautet, angepasst an die hier verwendete Notation einschließlich der Normierung,

$$\chi''_{+-}(\omega) = \frac{\omega\beta}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} G(t) e^{i\omega t} dt \quad \text{mit} \quad G(t) = \langle S^+(t) S^- \rangle_T. \quad (2.44)$$

Für eine kleine Störung des $SU(2)$ -symmetrischen Modells, beschrieben durch einen kleinen Parameter ϵ , wird zunächst ein vom Magnetfeld abhängiger Term abgespalten, $G(t) = G(\epsilon, t) e^{-iht}$. Hierbei muss $G(\epsilon, t)$ für $\epsilon \rightarrow 0$ von der Zeit t unabhängig sein, damit sich in diesem Fall die δ -Funktion ergibt. Die Entwicklung der Funktion $G(\epsilon, t)$ um $\epsilon = 0$ wird in [58] auf eine Funktion $\psi(\epsilon, t)$ übertragen, die durch $G(\epsilon, t) = G(\epsilon, 0) e^{\psi(\epsilon, t)}$ definiert ist. Die absorbierte Intensität lautet hiermit

$$I(\omega) = \frac{\omega^2\beta}{4L} G(\epsilon, 0) \int_{-\infty}^{\infty} e^{\psi(\epsilon, t) + i(\omega-h)t} dt. \quad (2.45)$$

Die Entwicklung von $\psi(\epsilon, t)$ wird nach der zweiten Ordnung in ϵ abgebrochen, weil damit schon interessante Effekte wie z. B. *dipolar broadening* in der Kernspinresonanzspektroskopie und *exchange narrowing* in ESR erklärt werden können [35, 58]. Die Übertragung der Entwicklung von G auf ψ stellt wegen des exponentiellen Zusammenhangs eine spezielle Art einer Entwicklung mit unendlich vielen Termen dar. Die Linienbreite η kann in dieser Näherung durch $\langle A^\dagger A \rangle / \langle S^+ S^- \rangle$ abgeschätzt werden [58, 89], wobei A den Kommutator von S^+ mit der kleinen Störung H' bezeichnet. In der Arbeit [91] von Reiter und Boucher wird die Anwendung der Näherung von Kubo und Tomita auf ein- oder zweidimensionale Systeme kritisiert.

In den Arbeiten [77, 78] von Mori und Kawasaki werden die kollektive Bewegung von Spins und die aus ihrer Austauschwechselwirkung resultierenden Dämpfungsfaktoren untersucht. Hierzu wird die Funktion $f(t) \sim G(\epsilon, t)$ durch einen Exponentialausdruck genähert,

$$f(t) \approx \exp \left[t \int_0^{\tau_c} \frac{d^2}{ds^2} f(s) ds \right], \quad (2.46)$$

wobei τ_c die Zerfallszeit von f bezeichnet. Für die Linienform ergibt sich damit eine Cauchy-Lorentz-Verteilung [78], deren Breite η mit der Fouriertransformierten \tilde{G} der ungestörten retardierten Greenschen Funktion $G(t) = i\Theta(t) \langle [S^+(t), S^-(0)] \rangle$ über $\eta = \text{Im}[\tilde{G}(\omega = h)]/2\chi_u h$

zusammenhängt, wobei χ_u die magnetische Suszeptibilität bezeichnet. Der Zusammenhang zur Linienbreite von Kubo und Tomita ist in [89] aufgezeigt.

Insbesondere für tiefe Temperaturen oder für stark gekoppelte Systeme mit großen Quantenfluktuationen sind die Gültigkeitsbereiche beider Näherungen eingeschränkt. In Abschnitt 4.1 der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass die Absorptionskurve keine Cauchy-Lorentz-Verteilung sein kann. Weiterhin wird in [24] und [89] beobachtet, dass eine naive Anwendung der Kubo-Tomita- bzw. der Mori-Kawasaki-Theorie auf kleine Störungen vom Dzyaloshinskii-Moriya-Typ falsche Resultate liefert.

Feldtheoretischer Zugang von Oshikawa und Affleck

In dem feldtheoretischen Zugang von Oshikawa und Affleck [87–89] wird zur Summation unendlich vieler Terme ein Selbstenergie-Formalismus verwendet.

Für ein $SU(2)$ -symmetrisches Modell ohne Störung und für tiefe Temperaturen ergibt sich innerhalb dieses Zugangs die retardierte Greensche Funktion zu [94]

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{(\Delta^+, \Delta^-)}(\omega, q) = & -\sin(2\pi\Delta^+)(2\pi T)^{2(\Delta^+ + \Delta^- - 1)} \\ & \times B\left(\Delta^+ - i\frac{\omega + q}{4\pi T}, 1 - 2\Delta^+\right) B\left(\Delta^- - i\frac{\omega - q}{4\pi T}, 1 - 2\Delta^-\right), \end{aligned} \quad (2.47)$$

wobei $B(x, y)$ die Eulersche Betafunktion und Δ^\pm die konformen Gewichte des primären Feldes bezeichnen. Diese werden durch den sogenannten Kompaktifizierungsradius R bestimmt [32], $\Delta^\pm = (2\pi R \pm 1/R)^2/8\pi$. Bei angelegtem Magnetfeld reduziert sich die $SU(2)$ - auf eine $U(1)$ -Symmetrie, und R ist vom Magnetfeld abhängig.

Laut Oshikawa und Affleck [89] muss zur Beschreibung von ESR diese Magnetfeldabhängigkeit vernachlässigt und stattdessen der $SU(2)$ -symmetrische Wert $R = 1/\sqrt{2\pi}$ benutzt werden, damit sich für $h \neq 0$ in Gleichung (2.47) mit $q = h$ die gewünschte δ -Funktion $\delta(\omega - h)$ ergibt. Gleichzeitig wird die Magnetfeldabhängigkeit der Spingeschwindigkeit unterdrückt, und diese auf ihren $SU(2)$ -Wert $v = 1$ gesetzt, damit die Resonanz genau bei $\omega = q = h$ liegt (siehe Abbildung 2 in [89]). Die Begründung dieser beiden Näherungen basiert auf einem Renormierungsgruppenargument, das allerdings nicht bewiesen wird.

Weiter wird argumentiert, dass ebenso für gewisse Störungen des Systems die Magnetfeldabhängigkeit von v und R vernachlässigt werden kann, solange diese Störung klein ist. Mit dieser Vorgehensweise und dem Selbstenergie-Formalismus wird schließlich gezeigt, dass die Linienform in der Nähe der Resonanzfrequenz $\omega = h$ durch eine Cauchy-Lorentz-Verteilung beschrieben wird, deren Breite für eine anisotrope Austauschwechselwirkung der Stärke $J\delta < 0$ parallel zum Magnetfeld durch

$$\eta = \frac{4\delta^2}{\pi^3} T \left[\ln\left(\frac{J}{\max(T, h)}\right) \right]^2 \quad \text{für } E_c \ll h, T \ll J \quad (2.48)$$

mit der Crossover-Energie $E_c = Je^{-\pi/\sqrt{-8\delta}}$ gegeben ist [89].

Für die XXZ-Kette im kritischen Bereich, beschrieben durch den Hamiltonoperator aus Gleichung (3.5) mit $\Delta = \cos\gamma \leq 1$, liefert Gleichung (2.47) mit $2\pi R^2 = 1 - \gamma/\pi$ im Bereich $T, h \ll J$ selbst für größere Anisotropien eine gute Beschreibung des Absorptionsspektrums [89]. In diesem Fall allerdings ist die dynamische Suszeptibilität nur für $T \ll h$ Cauchy-Lorentz-förmig, und die

Linienbreite wird nicht mehr durch Gleichung (2.48) beschrieben, weil E_c in der Größenordnung von J liegt. In Abbildung 14 von [67] wird Gleichung (2.47) für $\delta = -1$, $h = 0$ und $T = J/18$ mit der entsprechenden numerisch berechneten dynamischen Suszeptibilität χ''_{xx} verglichen und eine Übereinstimmung für kleine Frequenzen festgestellt. Für größere Temperaturen T oder für $h = 0.4J$ bzw. $h = 0.6J$ konnte hingegen keine Übereinstimmung gefunden werden.

Die feldtheoretische Methode von Oshikawa und Affleck kann auf die eindimensionale XXZ-Kette aus Kapitel 3 nur für $Je^{-\pi/\sqrt{-8\delta}} \ll h, T \ll J$ angewendet werden, was wiederum voraussetzt, dass $|\delta|$ sehr klein ist. In diesem Parameterbereich ist die Linienbreite, definiert über die Breite der berechneten Cauchy-Lorentz-Verteilung, gemäß Gleichung (2.48) proportional zu δ^2 und für $h > T$ proportional zu T .

Numerische Arbeiten

In den Arbeiten von Miyashita et al. [27, 76, 84, 85] werden die dynamische Suszeptibilität χ''_{xx} und die entsprechenden, über die Momente definierten ESR-Parameter numerisch berechnet. Die Rechnungen basieren auf einer Spektraldarstellung der Form (2.31) und einer vollständigen Diagonalisierung, weshalb sie nicht auf spezielle Symmetrien des Hamiltonoperators angewiesen sind. Insbesondere werden auf diese Weise Abhängigkeiten der ESR-Parameter vom Winkel zwischen dem Magnetfeld und der Richtung der Anisotropie [76] sowie kompliziertere Systeme wie z. B. Zick-Zack-Spinketten und dreidimensionale Spinsysteme [85] untersucht. In der jüngsten Arbeit [27] werden ein- und zweidimensionale Systeme mit Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung betrachtet, für die sich eine interessante Doppelpack-Struktur der dynamischen Suszeptibilität ergibt.

Der Nachteil dieses Zugangs wiederum besteht darin, dass diese Art der numerischen Analyse wegen des enormen Rechenaufwands auf kleine Systeme beschränkt ist. In den Arbeiten [76, 84, 85] werden deshalb nur Systeme bestehend aus maximal 10 Spins untersucht. Dabei treten, wie auch in den numerischen Analysen der vorliegenden Arbeit, Probleme für tiefe Temperaturen auf. In diesem Fall liefert nämlich die Spektraldarstellung (2.31) eine Summe von δ -Funktionen, in der die meisten wegen der Boltzmann-Faktoren exponentiell unterdrückt werden. Aufgrund des *Finite-Size*-Spektrums ergibt sich somit für die numerisch berechnete Absorptionskurve eine unruhige Struktur, ähnlich wie es die Kurven in den Abbildungen 5.2 und 7.5 der vorliegenden Arbeit zeigen. Dennoch ist in Abbildung 8 aus [85] selbst für tiefe Temperaturen ($T = 0.5J$) eine gewisse Struktur in der Linienform zu erkennen, die in [20] mit der Struktur der dynamischen Suszeptibilität im Ising-Limes verglichen wird.

In der Arbeit [67] von Maeda und Oshikawa wird die dynamische Suszeptibilität des eindimensionalen Spin-1/2-XY-Modells numerisch untersucht. Da dieses Modell mit Hilfe der Jordan-Wigner-Transformation [45] diagonalisiert werden kann, können die Eigenwerte und Eigenzustände des Hamiltonoperators analytisch bestimmt werden. Die Berechnung des Absorptionsspektrums reduziert sich auf Pfaffsche Determinanten der Größe L , die in [67] für eine Kette der Länge $L = 400$ berechnet wird. Für so große Werte von L sind die numerisch berechneten Kurven selbst für tiefe Temperaturen ($T = J/18$) glatt und die *Finite-Size*-Korrekturen sehr klein. Im Grenzfall hoher Temperatur ($T = 1000J$) werden die numerischen Daten mit dem exakten Ergebnis von Brandt und Jacoby [19] verglichen, und es wird eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt (vergleiche hierzu auch Abbildung 6.2 der vorliegenden Arbeit). Weiterhin wird in [67] festgestellt, dass die dynamische Suszeptibilität für $h = 0$ und $T = J/18$ mit der Funktion aus Gleichung (2.47) im Frequenzbereich $0 \leq \omega \leq 0.1J$ gut approximiert werden kann.

2.4.2 Arbeiten zu den ESR-Parametern

Momentenmethode von van Vleck

In der Arbeit [106] von van Vleck wird die Linienbreite der Absorptionskurve über ihr zweites Moment definiert und untersucht. Dabei werden Modelle betrachtet, die neben der Spinaustausch-Wechselwirkung auch noch Dipol-Dipol-Wechselwirkungen (DD-WW) beinhalten. Beide Wechselwirkungstypen sind hierbei nicht auf nächste Nachbarn eingeschränkt. Der Spin auf jedem Gitterplatz besitzt den Wert S und das System kann ein-, zwei- oder dreidimensional sein.

Die Absorptionskurve eines Modells mit allgemeiner DD-WW weist sogenannte Satelliten-Peaks auf, die deswegen vorhanden sein können, weil dieses Modell weder $SU(2)$ - noch $U(1)$ -symmetrisch ist. Damit sind Übergänge zwischen Zuständen des Systems erlaubt, deren magnetische Quantenzahl sich um mehr als $\Delta M = \pm 1$ unterscheidet [106]. Wegen $\Delta M = 0, \pm 2, \dots$ besteht das Absorptionsspektrum aus mehreren Peaks an den Stellen der entsprechenden Zeeman-Energien $\omega = 0, \pm 2h, \dots$, deren Amplituden aufgrund der geringen Stärke der DD-WW entsprechend klein sind. Laut van Vleck müssen die für diese Satelliten-Peaks verantwortlichen Terme des Hamiltonoperators vernachlässigt werden, um die Breite des zentralen Peaks bei $\omega = h$ mit dem zweiten Moment bestimmen zu können. Der resultierende $U(1)$ -symmetrische Hamiltonoperator lautet [106]

$$H = \sum_{(j,k)} A_{jk} \mathbf{s}_j \mathbf{s}_k + \sum_{(j,k)} B_{jk} s_j^z s_k^z - h \sum_j s_j^z \quad (2.49)$$

mit den Austauschtermen A_{jk} und den Dipol-Dipol-Termen B_{jk} . Die mittlere quadratische Abweichung wird in [106] als die mit dem Quadrat der entsprechenden Frequenz gewichtete Feinstruktur-Komponente definiert und berechnet zu

$$\Delta\omega^2 = \frac{\sum_{m,n} \omega_{mn}^2 |S_{mn}^x|^2}{\sum_{m,n} |S_{mn}^x|^2} = \frac{S(S+1)}{3} \sum_k B_{jk}^2. \quad (2.50)$$

Sie ist somit von den isotropen Austauschwechselwirkungen A_{jk} unabhängig. Ein Vergleich dieser Definition mit der Spektraldarstellung (2.31) macht deutlich, dass Gleichung (2.50) die Linienbreite im Grenzfall unendlich hoher Temperatur darstellt. In Anhang B.5 wird der Zusammenhang mit der Linienbreite der XXZ-Kette bei unendlich hoher Temperatur aufgezeigt.

Kanamori-Tachiki- und Nagata-Tazuke-Zugang zur Resonanzverschiebung

Kanamori und Tachiki gehen in ihrer Arbeit [46] von einem semi-klassischen Ansatz über die Spindynamik aus. Sie betrachten zunächst ferromagnetische Spinsysteme und übertragen ihr Resultat für die Resonanzverschiebung auch auf antiferromagnetische. Es wird angenommen, dass der Gesamtspin um die Richtung seines Gleichgewichtszustands präzediert, und zwar mit einer so kleinen Frequenz, dass sich das System bezüglich aller anderen vorkommenden Freiheitsgrade für jede aktuelle Position des Gesamtspins im Gleichgewicht befindet. Dies wird mathematisch durch einen statistischen Operator beschrieben, dessen Zeitabhängigkeit ausschließlich durch die Richtung des Gesamtspins bestimmt ist.

Unter der Annahme, dass diese Richtung für alle Zeiten nur wenig von der des Magnetfeldes abweicht, werden in [46] für die zugehörigen Winkel die Differentialgleichungen des harmonischen Oszillators abgeleitet. Wird das Magnetfeld in z -Richtung angelegt, lautet die Frequenz, mit

der der Gesamtspin um die Richtung des Magnetfeldes präzediert,

$$\omega = \frac{(\langle [S^x, [S^x, H - hS^z]] \rangle_T \langle [S^y, [S^y, H - hS^z]] \rangle_T)^{1/2}}{\langle S^z \rangle_T}. \quad (2.51)$$

Für große Magnetfelder der Stärke h kann Gleichung (2.51) entwickelt werden und es ergibt sich für die Resonanzverschiebung

$$\omega - h = \frac{\langle [S^+, [H, S^-]] \rangle_T}{2 \langle S^z \rangle_T} \quad \text{mit} \quad S^\pm = S^x \pm iS^y. \quad (2.52)$$

Die gleiche Formel wird in der Arbeit [81] von Nagata und Tazuke unter der Annahme hergeleitet, dass Spinrelaxationseffekte vernachlässigt werden können, was effektiv einer Ein-Moden-Näherung für die Spindynamik des Aufsteigers S^+ entspricht, d. h. $S^+(t) = e^{-i\omega t} S^+$. Andererseits erfüllt der Aufsteiger die Bewegungsgleichung $i\partial_t S^+ = [S^+, H - hS^z]$ und es folgt

$$\begin{aligned} 2\omega \langle S^z \rangle_T &= \omega \langle [S^+, S^-] \rangle_T = i \langle [\dot{S}^+(0), S^-] \rangle_T \\ &= \langle [[S^+(0), H - hS^z], S^-] \rangle_T = 2h \langle S^z \rangle_T + \langle [[S^+, H], S^-] \rangle_T, \end{aligned} \quad (2.53)$$

was äquivalent zu Gleichung (2.52) ist.

In [81] wird die Resonanzverschiebung für ein eindimensionales Heisenberg-Modell mit dipolarer Wechselwirkung im Grenzfall großer Spins untersucht und mit dem klassischen Resultat von Fisher aus [31] verglichen. Für Systeme mit großen Quantenfluktuationen wie z. B. eindimensionale antiferromagnetische Spin-1/2-Modelle ist die Näherung klassischer Spins nicht zulässig und führt zu falschen Resultaten [66, 69].

Obwohl die Herleitungen der Resonanzverschiebung (2.52) in den Zugängen von Kanamori und Tachiki sowie von Nagata und Tazuke auf einer etwas undurchsichtigen Näherung bzw. einem eher intuitiven Argument beruhen, liefern sie eine exakte Formel, sofern die Resonanzverschiebung über das erste Moment der dynamischen Suszeptibilität χ''_{+-} definiert wird. Dies zeigen Nagata und Tazuke in Anhang A ihrer Arbeit [81]. Formel (2.52) gilt dann für beliebige Hamiltonoperatoren und für alle Temperaturen und Magnetfelder.

Die Anwendbarkeit von Gleichung (2.52) ist wegen der komplizierten Korrelationsfunktion im Zähler auf einfache Systeme eingeschränkt. Weiterhin kann unter Umständen die Interpretation als Peakposition schwierig sein (siehe hierzu die Diskussion in Abschnitt 2.3.3).

Exakte Resonanzverschiebung von Maeda, Sakai und Oshikawa

In der Arbeit [69] von Maeda, Sakai und Oshikawa werden eindimensionale Spinsysteme mit anisotroper Austauschwechselwirkung in der Nähe des isotropen Punktes untersucht. Die Resonanzverschiebung $\delta\omega_{xx}$ wird über das erste Moment der dynamischen Suszeptibilität $\chi''_{xx}(\omega)$ definiert. Hierbei ist zu beachten, dass dies eine ungerade Funktion in ω ist und damit ihr Normierungsintegral verschwindet. Aus diesem Grund schränken Maeda et al. den Integrationsbereich auf positive Frequenzen ein und leiten hiermit die Resonanzverschiebung (2.52) her, die in diesem Fall aber nur als Näherungsformel für kleine Anisotropien aufgefasst werden darf. Wenn die kleine Abweichung vom $SU(2)$ -symmetrischen Punkt $H_{SU(2)}$ mit H' bezeichnet wird, folgt [69]

$$\delta\omega_{xx} = \frac{\langle [S^+, [H', S^-]] \rangle_0}{2 \langle S^z \rangle_0} + \mathcal{O}(H'^2). \quad (2.54)$$

Hierbei ist mit $\langle \cdot \rangle_0$ der thermische Erwartungswert bezüglich des ungestörten Hamiltonoperators $H = H_{SU(2)} - hS^z$ gemeint. Die Resonanzverschiebung (2.54) wird in [69] mit Hilfe von Bethe-Ansatz-Techniken [53] exakt berechnet und kann damit für alle Temperaturen und Magnetfelder bestimmt werden. Zudem werden, basierend auf der in [66] hergeleiteten Beziehung $\delta\omega_{xx} \sim \int \langle S^z \rangle_0 dJ$ und der Tieftemperatur-Asymptotik der Magnetisierung [64], die logarithmischen Korrekturen der Resonanzverschiebung berechnet,

$$\delta\omega_{xx} = -\frac{2\delta}{J\pi^2} \left\{ \mathcal{L} + \frac{1}{2} \ln \mathcal{L} + \frac{1 + \ln \mathcal{L}}{4\mathcal{L}} - \frac{\sqrt{3}T^2}{2\pi J^2} + \frac{3}{4} \right\} \quad \text{mit} \quad \mathcal{L} = \ln J/T + \text{const.} \quad (2.55)$$

Aufgrund eines Vergleichs dieser Resonanzverschiebung mit der entsprechenden Formel aus [89] wird angenommen, dass für die Linienbreite eine analoge Formel gilt. Beide Formeln sind hierbei auf den Bereich $h \ll T \ll J$ und auf kleine Anisotropien beschränkt.

Störungsentwicklung der Resonanzverschiebung von Maeda und Oshikawa

Maeda und Oshikawa berechnen in ihrer Arbeit [68] die Resonanzverschiebung über das lokale Maximum der dynamischen Suszeptibilität $\chi''_{xx}(\omega)$ störungstheoretisch in der Nähe des isotropen Punktes. Hierzu wird die Ableitung von $\chi''_{xx}(\omega)$ gleich Null gesetzt und sowohl diese als auch die Stelle des Maximums ω_m in eine Taylorreihe des kleinen Störparameters um $\alpha = 0$ entwickelt. Die Kettenregel der Ableitung liefert mit $f_{(m,n)} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \partial_\alpha^m \partial_\omega^{n+1} \chi''_{xx}(\omega)|_{\omega=h}$

$$\omega_m = h - \frac{f_{(1,0)}}{f_{(0,1)}} \alpha - \frac{f_{(0,2)}f_{(1,0)}^2 - 2f_{(1,1)}f_{(1,0)}f_{(0,1)} + f_{(2,0)}f_{(0,1)}^2}{2f_{(0,1)}^3} \alpha^2. \quad (2.56)$$

Da die dynamische Suszeptibilität im isotropen Limes $\alpha \rightarrow 0$ durch eine δ -Funktion gegeben ist, $\chi''_{xx}(\omega) \sim \delta(\omega - h)$, wird das Argument von χ''_{xx} in die komplexe Ebene verschoben, $\omega \rightarrow \omega + i\epsilon$. Die einzelnen Terme in der Taylorentwicklung (2.56) um $\alpha = 0$ werden dann bestimmt, indem zuerst der Limes $\omega \rightarrow h$ und danach der Limes $\epsilon \rightarrow 0$ durchgeführt wird. Maeda und Oshikawa nehmen hierbei an, dass χ''_{xx} als Funktion des komplexen Parameters $\omega + i\epsilon$ die spezielle Form einer Cauchy-Lorentz-Verteilung besitzt.

Formel (2.56) für die Resonanzverschiebung wird in [66] und [68] auf die beiden eindimensionalen Systeme der XXZ-Kette (3.5) und des transversalen Ising-Modells angewendet. Insbesondere wird die Abhängigkeit der Resonanzverschiebung vom Winkel des Magnetfeldes zur Richtung der Anisotropie aufgezeigt.

Wird mit diesem Zugang von Maeda und Oshikawa versucht, die Linienbreite über die zweite Ableitung der dynamischen Suszeptibilität analog zu entwickeln, so lässt sich feststellen, dass in dieser Entwicklung der Term zweiter Ordnung im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ divergiert. Dies zeigt, dass die Limes $\alpha \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow h$ und $\epsilon \rightarrow 0$ nicht miteinander vertauscht werden dürfen, bzw. dass die Annahme der Cauchy-Lorentz-Verteilung nicht zutrifft.

3 Eindimensionales Spin-1/2-XXZ-Modell

Viele antiferromagnetische Materialien, wie z. B. das Material KCuF_3 aus [98–100], lassen sich näherungsweise durch das sogenannte Heisenberg-Modell beschreiben, welches durch den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{(i,j)} J_{ij} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \quad (3.1)$$

gegeben ist. Hierbei wird über alle Paare (i, j) von Gitterplätzen summiert, und die Konstanten J_{ij} bezeichnen das jeweils zugehörige Spinaustauschintegral. Falls diese Spinkopplungskonstanten positiv sind, liegt ein antiferromagnetisches Modell vor. Die Operatoren \mathbf{s}_i stellen die dem i -ten Gitterplatz zugeordneten Spinoperatoren dar. Der Spin auf jedem Gitterplatz kann je nach Material unterschiedlich sein, wobei im Folgenden nur der Fall betrachtet wird, dass auf allen Gitterplätzen ein Spin-1/2 sitzt. Das Skalarprodukt der Spinoperatoren beschreibt eine im Spinraum isotrope Kopplung, weshalb das Modell (3.1) auch isotropes Spin-1/2-Heisenberg-Modell genannt wird [95].

Das Spin-1/2-Heisenbergmodell kann als Spezialfall des Ein-Band-Hubbardmodells betrachtet werden [29],

$$H = \sum_{(i,j)} t_{ij} c_{i,a}^\dagger c_{j,a} + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow}. \quad (3.2)$$

Die Spezialisierung besteht darin, dass die durch das Hubbardmodell beschriebenen Elektronen untereinander eine so starke repulsive Wechselwirkung U erfahren, dass Doppelbesetzungen der Gitterplätze effektiv ausgeschlossen werden. Falls weiterhin jedes Atom genau ein Elektron zum betrachteten Energieband beisteuert, ist letzteres zur Hälfte gefüllt. In diesem Fall ist jeder Gitterplatz mit genau einem Elektron besetzt und somit ein Hüpfen der Elektronen zwischen den Gitterplätzen, in (3.2) durch die Hüpfmatrixelemente t_{ij} und den Operator $c_{i,a}^\dagger c_{j,a}$ mit fermionischen Erzeugern c^\dagger und Vernichtern c beschrieben, nicht möglich. Das System stellt somit einen Isolator dar. In zweiter Ordnung entarteter Störungsrechnung in $1/U$ reduziert sich das Ein-Band-Hubbardmodell bei halber Füllung auf das Spin-1/2-Heisenberg-Modell (3.1), wobei die Spinkopplungskonstanten durch die Hüpfmatrixelemente ausgedrückt werden können, $J_{ij} = 2|t_{ij}|^2/U$, siehe hierzu [29]. Bei dieser Argumentation und in der Definition (3.1) wurde keine Einschränkung an die Dimension des Systems gestellt.

Bevor nun das eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell eingeführt wird, ist es zweckmäßig zu definieren, was mit ein-, zwei- und dreidimensionalen Spinsystemen gemeint ist [8]. Dies lässt sich gut am Beispiel des Heisenberg-Modells erklären. Es wird zunächst von einem dreidimensionalen Spinsystem ausgegangen, weil die meisten realen Materialien dreidimensional sind. Die Summe in (3.1) läuft über alle Paare (i, j) von Gitterplätzen. Die zugehörigen Spinkopplungen J_{ij} beschreiben den Spinaustausch der jeweiligen Spins an den Plätzen i und j . Liegen diese Plätze weit auseinander, so ist der Wert von J_{ij} entsprechend klein. Für viele Materialien besteht deswegen eine gute Näherung darin, nur die Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn zu berücksichtigen. Weiterhin gibt es Materialien, für die die Kopplung an die Nachbarspins in eine

oder zwei Raumrichtungen viel schwächer ist als in die anderen Richtungen (siehe Tabelle 3.1). Können also die entsprechenden Terme vernachlässigt werden, reduziert sich die Summe über alle Paare von Gitterplätzen auf Summen über einzelne Ketten bzw. Gitterebenen. Das System ist damit effektiv ein- bzw. zweidimensional. Eine detailliertere Beschreibung solcher Materialien und deren Verbindung zur ESR-Spektroskopie wird in dem Übersichtsartikel [56] gegeben. Das für diese Arbeit relevante Material LiCuVO_4 ist in Abbildung 1 aus [28] schematisch dargestellt.

Weiterhin sind häufig wegen der Translationsinvarianz des Gitters die Wechselwirkungen zwischen benachbarten Spins innerhalb einer Richtung identisch. Gegenbeispiele hierzu sind Materialien, für die gestaffelte Wechselwirkungen auftreten, z. B. $(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)\text{CuCl}_3$ aus [90].

Zusammengefasst bedeutet dies für den eindimensionalen Fall der Kette, dass die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn innerhalb dieser Kette, die sogenannte *Intrachain*-Wechselwirkung J , viel größer ist als diejenige zwischen benachbarten Ketten, die sogenannte *Interchain*-Wechselwirkung J' . Typische Werte des Verhältnisses J'/J hängen vom jeweiligen Material ab und können bei 0.01 oder noch weniger liegen. Beispiele hierfür sind die Materialien KCuF_3 mit einem Wert von $J'/J = 0.016$ [98–100] oder $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ mit $J'/J = 0.001$ [36]. Das eindimensionale Spin-1/2-Heisenberg-Modell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung, das auch als isotrope Heisenberg-Kette oder kurz XXX-Kette bezeichnet wird [29], schreibt sich wie folgt

$$H = J \sum_{j=1}^L \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}. \quad (3.3)$$

Hierbei ist L die Zahl der Gitterplätze und wird als Kettenlänge bezeichnet.

Eindimensionale Systeme sind aus theoretischer Sicht besonders interessant, weil einige von ihnen exakt lösbar sind. Die Spin-1/2-Heisenberg-Kette liefert hierfür ein Beispiel. Ein weiteres ist durch das eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Modell gegeben.

3.1 Definition der XXZ-Kette

In diesem Abschnitt wird das anisotrope Spin-1/2-Heisenberg-Modell [25] eingeführt, indem das Skalarprodukt der Spinoperatoren $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ aus Gleichung (3.3) durch eine Anisotropie erweitert wird,

$$H_{XXZ} = J \sum_{j=1}^L \left(s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y + \underbrace{(1 + \delta)}_{=: \Delta} s_j^z s_{j+1}^z \right). \quad (3.4)$$

Im Folgenden wird stets davon ausgegangen, dass L gerade ist. Außerdem werden periodische Randbedingungen angenommen, d. h. $\mathbf{s}_{L+1} = \mathbf{s}_1$. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden sowohl δ als auch Δ gleichermaßen verwendet und als Anisotropieparameter des Modells bezeichnet. Aufgrund der Tatsache, dass sich die Anisotropie auf die Kopplung der z -Komponenten der Spins bezieht, wird dieses Modell auch eindimensionales Spin-1/2-XXZ-Modell, oder kurz XXZ-Kette, genannt [29]. Dieses effektive eindimensionale Modell ist beispielsweise in den in Tabelle 3.1 aufgelisteten Materialien realisiert. Für $\delta = 0$ ergibt sich wieder das isotrope, $SU(2)$ -symmetrische Heisenberg-Modell (3.3).

Die XXZ-Kette besitzt eine $U(1)$ -Symmetrie, weil der Hamiltonoperator (3.4) invariant unter Drehungen um die z -Achse ist. Ein longitudinales Magnetfeld in negative z -Richtung, beschrieben

Tab. 3.1: Liste von Materialien, in denen die XXZ-Kette (3.4) mit Anisotropieparameter Δ und einem Verhältnis J'/J aus *Inter-* und *Intrachain*-Wechselwirkung realisiert ist [47]. Die physikalischen Parameter wurden aus den Daten der jeweiligen Arbeiten ermittelt.

Material	$J[K]$	Δ	J'/J	Arbeiten
$\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$	10.6	1.02	0.0001	[37, 74]
CsCoCl_3	140(10)	7.4(5)	0.095	[54, 62, 70–72, 82, 114]
LiCuVO_4	26(4)	0.88(4)	0.045	[57, 69, 107]
Cs_2CoCl_4	2.7(2)	0.25	0.05(1)	[26, 115]

durch die Zeeman-Kopplung $H_Z = -hS^z$, ändert diese Symmetrie nicht. Der Hamiltonoperator der XXZ-Kette in einem solchen Feld lautet, geschrieben mit den lokalen Auf- und Absteigern s_j^\pm ,

$$H = H_{XXZ} + H_Z = J \sum_{j=1}^L \left(\frac{1}{2} \left(s_j^+ s_{j+1}^- + s_j^- s_{j+1}^+ \right) + (1 + \delta) s_j^z s_{j+1}^z \right) - h \sum_{j=1}^L s_j^z. \quad (3.5)$$

Für $J = 0$ ergibt sich der wechselwirkungsfreie Paramagnet. Da sich andererseits durch die Skalierung $J \rightarrow J/\delta$ und den Limes $\delta \rightarrow \infty$ das Ising-Modell (A.7) im longitudinalen Magnetfeld ergibt, wird für die XXZ-Kette in der Literatur auch der Begriff „eindimensionaler Spin-1/2-Heisenberg-Ising-Magnet“ verwendet [20, 21, 65, 96]. Die in Anhang A diskutierten Fälle, für die die absorbierte Intensität exakt angegeben werden kann, sind somit in der XXZ-Kette als Grenzfälle enthalten. Für den generischen Fall des anisotropen Antiferromagneten, $-1 \leq \delta < \infty$, $\delta \neq 0$ und $J > 0$, ist die genaue Linienform der Resonanzkurve bislang unbekannt.

Die XXZ-Kette (3.5) im longitudinalen Magnetfeld besitzt für $T = 0$ eine Phasengrenze, die die ferromagnetisch-massive von der antiferromagnetisch-kritischen Phase trennt. Der Phasenübergang ist für $\Delta > -1$ von zweiter, für $\Delta = -1$ von erster Ordnung [113] und die Grenzlinie im Δ - h -Phasendiagramm durch die Beziehung $h_c = (1 + \Delta)J$ mit $\Delta = 1 + \delta$ und $J > 0$ gegeben

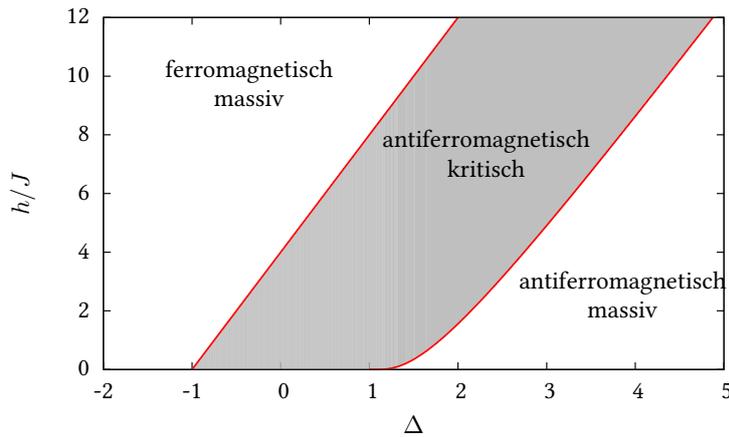


Abb. 3.1: Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette

(siehe Abbildung 3.1). Eine zweite Phasengrenzlinie wird durch

$$h_e = J \operatorname{th}(\eta) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{(-)^k}{\operatorname{ch}(\eta k)} \quad \text{mit} \quad \Delta = \operatorname{ch} \eta \quad (3.6)$$

beschrieben [25, 113] und trennt die antiferromagnetisch-kritische von der antiferromagnetisch-massiven Phase. Das vollständige Phasendiagramm des Grundzustands [25] ist in Abbildung 3.1 dargestellt, die der Arbeit [102] entnommen wurde. Wegen des Mermin-Wagner-Theorems [75] und der Eindimensionalität der XXZ-Kette gibt es diese scharfen Trennungen der Phasen nur für $T = 0$.

In der vorliegenden Arbeit wird für alle Magnetfelder h und Temperaturen T der kritische Bereich $-1 < \Delta < 1$ vom massiven Bereich $\Delta > 1$ unterschieden. Dies ist nicht zu verwechseln mit der antiferromagnetisch-kritischen und -massiven Phase der XXZ-Kette, die neben dem Anisotropieparameter Δ auch noch vom Wert des Magnetfeldes abhängen. Die Unterscheidung zwischen kritischem und massivem Bereich ist bei der Formulierung der nichtlinearen Integralgleichungen wichtig, die für die Berechnung kurzreichweitiger statischer Korrelationsfunktionen im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ nützlich sind [12] und im nächsten Abschnitt behandelt werden.

3.2 Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette

Speziell für die XXZ-Kette konnte in letzter Zeit ein großer Fortschritt in der Berechnung von kurzreichweitigen statischen Korrelationsfunktionen erzielt werden [15, 16, 44]. Es konnte gezeigt werden, dass diese durch drei Funktionen φ , ω und ω' ausgedrückt werden können, die durch Lösungen von linearen und nichtlinearen Integralgleichungen gegeben sind [12, 13, 103]. In diesem Sinne sind die kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette exakt berechenbar. Diese wichtige Eigenschaft wird bei der Berechnung der ESR-Parameter mittels der Momentenmethode in Kapitel 4 ausgenutzt. Im Folgenden wird erläutert, wie die statischen Korrelationsfunktionen im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ mit Hilfe von linearen und nichtlinearen Integralgleichungen berechnet werden können [12].

3.2.1 Reduzierte Dichtematrix für endliche Kettenabschnitte

Um den thermodynamischen Limes mathematisch zu formulieren, wird erstens davon ausgegangen, dass die Kettenlänge $L = 2N$ mit $N \in \mathbb{N}$ gerade ist, und zweitens wird der Summationsindex j im Hamiltonoperator (3.5) so verschoben, dass die Summen von $-N + 1$ bis N laufen. Der auf diese Weise formulierte Hamiltonoperator wird mit H_N bezeichnet, und der statistische Operator (2.3) zu festem N lautet

$$\rho_N = \frac{e^{-\beta H_N}}{\operatorname{Sp}_{-N+1, \dots, N} \{e^{-\beta H_N}\}} \quad \text{mit} \quad \beta = 1/T. \quad (3.7)$$

Die Indizes an der Spur bedeuten, dass diese nur bezüglich der entsprechenden Räume auszuführen ist, im Nenner von Gleichung (3.7) also bezüglich des gesamten Hilbertraums $(\mathbb{C}^2)^{\otimes 2N}$. Um den thermodynamischen Limes $N = L/2 \rightarrow \infty$ durchführen zu können, wird zunächst für eine

feste natürliche Zahl $n \leq N$ die sogenannte Dichtematrix eines Abschnitts $[1, n]$ der unendlichen Kette eingeführt [12],

$$D_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Sp}_{-N+1, \dots, -1, n+1, n+2, \dots, N} \{ \rho_N \} . \quad (3.8)$$

Die Dichtematrix eines Abschnitts der Länge $n - 1$ kann aus der Dichtematrix eines überlappenden Abschnitts der Länge n bestimmt werden, $D_{n-1} = \text{Sp}_n D_n$. Wegen der Translationsinvarianz des Hamiltonoperators ist es ausreichend, den Vektorraum \mathcal{W} derjenigen Operatoren zu betrachten, die nur auf einer endlichen Anzahl von positiven Gitterplätzen nichttrivial wirken.

Die Abbildung $\text{trf}_n : \mathcal{W} \rightarrow \text{End}((\mathbb{C}^2)^{\otimes n})$ mit

$$\text{trf}_n \{ \mathcal{O} \} = \dots \frac{1}{2} \text{Sp}_{-2} \frac{1}{2} \text{Sp}_{-1} \frac{1}{2} \text{Sp}_0 \frac{1}{2} \text{Sp}_{n+1} \frac{1}{2} \text{Sp}_{n+2} \dots \{ \mathcal{O} \} \quad (3.9)$$

stellt die Einschränkung eines Operators $\mathcal{O} \in \mathcal{W}$ auf den endlichen Kettenabschnitt $[1, n]$ dar. Ferner ist das Funktional $\langle \cdot \rangle_T : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{Sp}_{1, \dots, n} \{ D_n \text{trf}_n \mathcal{O} \} \quad (3.10)$$

wohldefiniert. Es beschreibt den thermischen Erwartungswert eines Operators \mathcal{O} im thermodynamischen Limes und übernimmt die Rolle des statistischen Operators $\rho_{N \rightarrow \infty}$ im Vektorraum \mathcal{W} . Deswegen wird es auch reduzierte Dichtematrix genannt. In [14] wird aufbauend auf der Arbeit [15] von Boos et al. eine explizite Formel für dieses Funktional angegeben. Die Einträge der 2^n -dimensionalen Dichtematrix D_n sind durch Polynome in drei Funktionen φ , ω und ω' und deren Ableitungen an der Stelle Null gegeben,

$$\varphi_{(n)} = \partial_x^n \varphi(x)|_{x=0} \quad \text{und} \quad f_{(m,n)} = \partial_x^m \partial_y^n f(x, y)|_{x=y=0} \quad \text{für} \quad f = \omega, \omega'. \quad (3.11)$$

Die entsprechenden Koeffizienten hängen vom Wert des Anisotropieparameters Δ ab und wurden in [12, 14] berechnet. Wegen der Erhaltung des Gesamtspins sind von den 2^{2n} Einträgen der Dichtematrix D_n nur $\binom{2n}{n}$ ungleich Null, wie eine einfache kombinatorische Überlegung zeigt. Diese sind allerdings selbst für kleine Werte von n komplizierte Ausdrücke in den drei Funktionen φ , ω und ω' , weshalb hier auf ihre explizite Darstellung verzichtet wird.

Die physikalischen Größen Temperatur T , Magnetfeld h und Kopplung J gehen ausschließlich in die drei Funktionen φ , ω und ω' ein, weshalb deren Berechnung auch „physikalischer Teil“ des Problems genannt wird [13]. Entsprechend ist mit dem „algebraischen Teil“ die Berechnung der von den physikalischen Parametern T , h und J unabhängigen Koeffizienten der Polynome gemeint. Die Komplexität der Polynome nimmt mit wachsender Zahl der Gitterplätze in den Korrelationsfunktionen und mit größer werdendem Abstand extrem stark zu. Beispielsweise lauten die Einpunktfunktion $\langle s_1^z \rangle_T$ sowie die Nächste- und Übernächste-Nachbar-Korrelationsfunktion $\langle s_1^z s_{2,3}^z \rangle_T$ für den massiven Bereich $\text{ch}(\eta) = \Delta > 1$ [103]

$$\langle s_1^z \rangle_T = -\frac{1}{2} \varphi_{(0)}, \quad (3.12a)$$

$$\langle s_1^z s_2^z \rangle_T = \frac{\text{cth}(\eta)}{4} \omega_{(0,0)} + \frac{1}{4\eta} \omega'_{(1,0)}, \quad (3.12b)$$

$$\langle s_1^z s_3^z \rangle_T = \frac{\text{cth}(2\eta)}{2} \omega_{(0,0)} + \frac{1}{4\eta} \omega'_{(1,0)} + \frac{\text{th}(\eta)}{16} (\omega_{(2,0)} - 2\omega_{(1,1)}) - \frac{\text{sh}^2(\eta)}{16\eta} \omega'_{(2,1)}. \quad (3.12c)$$

Für den kritischen Bereich ergeben sich analoge Ausdrücke [12]. Solche expliziten Darstellungen sind nur für kurzreichweitige Korrelationsfunktionen möglich, weil sonst der Aufwand der algebraischen Rechnungen selbst unter Zuhilfenahme von Computeralgebra-Programmen zu groß ist. In [12], [14] und [103] werden alle statischen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette für maximal vier Gitterplätze berechnet, und für $h = 0$ konnten in [92] sogar Korrelationsfunktionen mit bis zu sieben Gitterplätzen berechnet werden.

Die drei Funktionen φ , ω und ω' sind bestimmt durch Lösungen von linearen und nichtlinearen Integralgleichungen [12,13,103], die in den folgenden Abschnitten präsentiert werden. Hierbei müssen der kritische Bereich $-1 \leq \Delta < 1$ und der massive Bereich $\Delta > 1$ unterschieden werden. Um die kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen ähnlich wie die freie Energie in [52] bzw. ihre Ableitungen in [53] numerisch zu berechnen, bietet sich die sogenannte $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Formulierung der nichtlinearen Integralgleichungen (NLIEs) an, weil dann die auftretenden Integrationen ausschließlich entlang der reellen Achse ausgeführt werden. Im Gegensatz zur \mathfrak{a} -Formulierung mit Konturintegralen in der komplexen Ebene [14] muss in der $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Formulierung zwischen dem kritischen Bereich $-1 \leq \Delta < 1$ und dem massiven Bereich $\Delta > 1$ der XXZ-Kette (3.4) unterschieden werden. In den beiden folgenden Abschnitten werden alle relevanten Formeln für beide Bereiche angegeben. Eine ausführliche Herleitung für den massiven Bereich ist in [102] zu finden.

3.2.2 Massiver Bereich

Im massiven Bereich wird die Anisotropie durch $\Delta = \text{ch}(\eta)$ parametrisiert. Die beiden NLIEs für die Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ lauten hiermit [103]

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\frac{2J \text{sh}(\eta)}{T} d(x) - \frac{h}{2T} + \kappa * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \kappa^- * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (3.13a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\frac{2J \text{sh}(\eta)}{T} d(x) + \frac{h}{2T} + \kappa * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \kappa^+ * \ln(1 + \mathfrak{b})(x), \quad (3.13b)$$

wobei der Stern $*$ die Faltung $(f * g)(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(x-y)g(y)dy$ bezeichnet. Die physikalischen Größen T , h und J tauchen ausschließlich in den Inhomogenitäten der Integralgleichungen auf. Alle nun folgenden Funktionen hängen von diesen Parametern nur über die Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ ab. Die Integrationskerne κ , κ^\pm und der sogenannte *Driving*-Term d sind durch Fourierreihen darstellbar, die insbesondere für numerische Berechnungen gut geeignet sind,

$$d(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2kx}}{\text{ch}(\eta k)}, \quad (3.14a)$$

$$\kappa(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\eta|k|+2ikx}}{2 \text{ch}(\eta k)}, \quad \kappa^\pm(x) = \kappa(x \pm i\eta^-), \quad (3.14b)$$

wobei $\eta^- = \eta - \epsilon$ und $\epsilon > 0$ eine kleine Zahl ist.

Die Funktionen φ , ω und ω' sind durch Integrale gegeben, in denen zwei weitere Paare von Hilfsfunktionen auftreten, die im Folgenden mit g_ν^\pm und g'_ν^\pm bezeichnet werden. Diese sind Lö-

sungen folgender linearer Integralgleichungen,

$$g_\nu^+(x) = -d(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - \kappa^- * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x), \quad (3.15a)$$

$$g_\nu^-(x) = -d(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - \kappa^+ * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x), \quad (3.15b)$$

$$\begin{aligned} g_\nu'^+(x) &= -c_+(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu'^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - \kappa^- * \frac{g_\nu'^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) \\ &\quad + l * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - l^- * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x), \end{aligned} \quad (3.15c)$$

$$\begin{aligned} g_\nu'^-(x) &= -c_-(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu'^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - \kappa^+ * \frac{g_\nu'^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) \\ &\quad + l * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - l^+ * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x). \end{aligned} \quad (3.15d)$$

Hierbei gehen die Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ und damit die Abhängigkeiten von T , h und J ausschließlich in die Integrationsmaße ein. Die Funktionen l und c_\pm sind durch ihre Fourierreihen gegeben,

$$l(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\text{sign}(k)e^{i2kx}}{4 \text{ch}^2(\eta k)}, \quad l^\pm(x) = l(x \pm i\eta^-), \quad c_\pm(x) = \pm \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{\pm\eta k + 2ikx}}{2 \text{ch}^2(\eta k)}, \quad (3.16)$$

wobei die Konvention $\text{sign}(0) = 0$ für die Vorzeichenfunktion sign verwendet wurde. Damit lassen sich schließlich die Funktionen $\varphi(\nu)$, $\omega(\nu_1, \nu_2)$ und $\omega'(\nu_1, \nu_2)$ schreiben als

$$\varphi(\nu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left(\frac{g_\nu^-(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)^{-1}} - \frac{g_\nu^+(x)}{1 + \mathfrak{b}(x)^{-1}} \right) dx, \quad (3.17a)$$

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = -4\kappa(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) + \tilde{K}_\eta(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - d * \left(\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} + \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} \right) (\tilde{\nu}_2), \quad (3.17b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\omega'(\nu_1, \nu_2)}{\eta} &= -4l(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) + \tilde{L}_\eta(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - d * \left(\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} + \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} \right) (\tilde{\nu}_2) \\ &\quad - c_- * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(\tilde{\nu}_2) - c_+ * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(\tilde{\nu}_2), \end{aligned} \quad (3.17c)$$

wobei $\tilde{\nu} = -i\nu$ und $\tilde{\nu}_j = -i\nu_j$ gesetzt wurde. Die Funktionen \tilde{K}_η und \tilde{L}_η sind gegeben durch

$$\tilde{K}_\eta(x) = \frac{\text{sh}(2\eta)}{2 \sin(x + i\eta) \sin(x - i\eta)}, \quad (3.18a)$$

$$\tilde{L}_\eta(x) = \frac{i \sin(2x)}{2 \sin(x + i\eta) \sin(x - i\eta)}. \quad (3.18b)$$

Um nun Korrelationsfunktionen zu berechnen, muss gemäß Gleichungen (3.11) der homogene Limes $\nu_1, \nu_2 \rightarrow 0$ durchgeführt werden. Einerseits können die algebraisch berechneten Koeffizienten Polstellen aufweisen, andererseits besitzen die aus Kombinationen von $\varphi(\nu)$, $\omega(\nu_1, \nu_2)$

und $\omega'(\nu_1, \nu_2)$ bestehenden Zähler Nullstellen, so dass die Regel von de l'Hospital angewendet werden kann. Dies ist der Grund, warum in den Ausdrücken für die Korrelationsfunktionen wie z. B. in (3.12) Ableitungen der Funktionen φ , ω und ω' bezüglich ν_1 und ν_2 , ausgewertet an der Stelle $\nu_1 = \nu_2 = 0$, auftauchen.

3.2.3 Kritischer Bereich

Im kritischen Bereich ist eine geeignete Parametrisierung der Anisotropie durch $\Delta = \cos(\gamma)$ gegeben. Wie im massiven Bereich gilt auch hier, dass die Parameter T , h und J nur in die Inhomogenitäten der NLIEs eingehen.

Die Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ sind Lösungen der NLIEs [12]

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\frac{2\pi J \sin(\gamma)}{T\gamma \operatorname{ch}(\pi x/\gamma)} - \frac{\pi h}{2(\pi - \gamma)T} + F * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - F * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x + \eta^-), \quad (3.19a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\frac{2\pi J \sin(\gamma)}{T\gamma \operatorname{ch}(\pi x/\gamma)} + \frac{\pi h}{2(\pi - \gamma)T} + F * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - F * \ln(1 + \mathfrak{b})(x - \eta^-), \quad (3.19b)$$

wobei hier zum einen die Faltung $(f * g) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)g(y)dy$ und zum anderen $\eta = i\gamma$ definiert wurde. Die Kernfunktion F ist gegeben durch

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}\left(\left(\frac{\pi}{2} - \gamma\right)k\right) e^{ikx}}{2 \operatorname{sh}\left(\left(\pi - \gamma\right)\frac{k}{2}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{\gamma k}{2}\right)} dk. \quad (3.20)$$

Analog zum massiven Bereich werden für die Darstellungen der Funktionen φ , ω und ω' zwei weitere Paare von Hilfsfunktionen benötigt, die mit $g_{\mu}^{(\pm)}$ und $g'_{\mu}^{(\pm)}$ bezeichnet werden und die folgende lineare Integralgleichungen erfüllen,

$$g_{\mu}^{(+)}(x) = \frac{i\pi}{\gamma} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi(x-\mu)}{\gamma}\right) + \frac{F}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g_{\mu}^{(+)}(x) - \frac{F}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g_{\mu}^{(-)}(x + \eta^-), \quad (3.21a)$$

$$g_{\mu}^{(-)}(x) = \frac{i\pi}{\gamma} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi(x-\mu)}{\gamma}\right) + \frac{F}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g_{\mu}^{(-)}(x) - \frac{F}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g_{\mu}^{(+)}(x - \eta^-) \quad (3.21b)$$

und

$$g'_{\mu}^{(+)}(x) = \left(\frac{i\pi}{\gamma}(x - \mu) - \frac{\pi}{2}\right) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi(x-\mu)}{\gamma}\right) + \gamma \frac{D}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g_{\mu}^{(+)}(x) - \gamma \frac{D}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g_{\mu}^{(-)}(x + \eta^-) \\ + \frac{F}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g'_{\mu}^{(+)}(x) - \frac{F}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g'_{\mu}^{(-)}(x + \eta^-), \quad (3.22a)$$

$$g'_{\mu}^{(-)}(x) = \left(\frac{i\pi}{\gamma}(x - \mu) + \frac{\pi}{2}\right) \operatorname{sech}\left(\frac{\pi(x-\mu)}{\gamma}\right) + \gamma \frac{D}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g_{\mu}^{(-)}(x) - \gamma \frac{D}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g_{\mu}^{(+)}(x - \eta^-) \\ + \frac{F}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} * g'_{\mu}^{(-)}(x) - \frac{F}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} * g'_{\mu}^{(+)}(x - \eta^-). \quad (3.22b)$$

Die Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ und damit die Parameter T , h und J gehen dabei nur in die Integrationsmaße ein. Die Kernfunktion D ist gegeben durch

$$D(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(kx) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi k}{2}\right) \operatorname{ch}\left(\left(\frac{\pi}{2} - \gamma\right)k\right)}{4 \operatorname{sh}^2\left(\left(\pi - \gamma\right)\frac{k}{2}\right) \operatorname{ch}^2\left(\frac{\gamma k}{2}\right)} dk. \quad (3.23)$$

Die Funktionen $\varphi(\mu)$, $\omega(\mu_1, \mu_2)$ und $\omega'(\mu_1, \mu_2)$, die die explizite Form der Korrelationsfunktionen bestimmen, können mit diesen Hilfsfunktionen und den Funktionen $K^{(\pm)}$, $f_\mu^{(\pm)}$, definiert durch

$$K^{(\pm)}(\mu) = \text{cth}(\mu - \eta) \pm \text{cth}(\mu + \eta), \quad f_\mu^{(\pm)}(x) = g_\mu^{(\pm)}(x) \mp \frac{i\gamma}{2} g_\mu^{(\pm)}(x), \quad (3.24)$$

geschrieben werden als

$$\varphi(\mu) = \frac{1}{2(\pi - \gamma)i} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{g_\mu^{(+)}(x)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(x)} - \frac{g_\mu^{(-)}(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(x)} \right] dx, \quad (3.25a)$$

$$\begin{aligned} \omega(\mu_1, \mu_2) = & -\frac{1}{2} K^{(-)}(\mu_1 - \mu_2) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}\left((\pi - \gamma)\frac{k}{2}\right) \cos(k(\mu_1 - \mu_2))}{i \text{sh}\left(\frac{\pi k}{2}\right) \text{ch}\left(\frac{\gamma k}{2}\right)} dk \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\gamma \text{ch}\left(\frac{\pi(x - \mu_2)}{\gamma}\right)} \left[\frac{g_{\mu_1}^{(+)}(x)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(x)} + \frac{g_{\mu_1}^{(-)}(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(x)} \right] dx, \end{aligned} \quad (3.25b)$$

$$\begin{aligned} \omega'(\mu_1, \mu_2) = & \frac{\eta}{2} K^{(+)}(\mu_1 - \mu_2) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma \sin(k(\mu_1 - \mu_2))}{2i \text{th}\left(\frac{\pi k}{2}\right) \text{ch}^2\left(\frac{\gamma k}{2}\right)} dk \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\gamma \text{ch}\left(\frac{\pi(x - \mu_2)}{\gamma}\right)} \left[\frac{f_{\mu_1}^{(+)}(x)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(x)} + \frac{f_{\mu_1}^{(-)}(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(x)} \right] dx \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x - \mu_2)}{\gamma \text{ch}\left(\frac{\pi(x - \mu_2)}{\gamma}\right)} \left[\frac{g_{\mu_1}^{(+)}(x)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(x)} + \frac{g_{\mu_1}^{(-)}(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(x)} \right] dx. \end{aligned} \quad (3.25c)$$

Zur Berechnung der Korrelationsfunktionen müssen demnach zuerst die NLIes für die beiden Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ und dann die linearen Integralgleichungen für $g_\mu^{(\pm)}$ und $g'_\mu^{(\pm)}$ gelöst werden. Dies geschieht iterativ und unter Benutzung der Fast-Fourier-Transformation, weil erstens die Faltungen im Fourierraum zu gewöhnlichen Produkten werden und zweitens die Kerne und *Driving*-Terme als Fourier-Reihen im massiven Bereich bzw. als Fourier-Transformierte im kritischen Bereich gegeben sind. Außerdem stellt diese einen schnellen Algorithmus mit hoher numerischer Genauigkeit dar. Die Ableitungen der Funktionen $g_\mu^{(\pm)}$ und $g'_\mu^{(\pm)}$ bezüglich μ , wie sie für die Ableitungen $\varphi^{(n)}$, $\omega_{(m,n)}$ und $\omega'_{(m,n)}$ aus Gleichung (3.11) benötigt werden, erfüllen wiederum lineare Integralgleichungen, die im Fourierraum einfach berechnet werden können. Die Werte von $\varphi^{(n)}$, $\omega_{(m,n)}$ und $\omega'_{(m,n)}$ können auf diese Weise mit hoher Genauigkeit bestimmt werden.

4 Momentenmethode

Unter der Momentenmethode wird die Definition und Berechnung der ESR-Parameter über die Momente der absorbierten Intensität verstanden. Als Grundlage hierfür wird benutzt, dass die absorbierte Intensität (4.1a) nach Abschnitt 2.2.2 positiv ist und nach Abschnitt 2.3.1 durch die integrierte Intensität normiert werden kann. Die daraus resultierende Funktion wird als Dichtefunktion einer Verteilung interpretiert und die Resonanzverschiebung bzw. Linienbreite über ihren Mittelwert (2.40) bzw. ihre mittlere quadratische Abweichung (2.43) definiert. Die Idee, die Momente der Verteilung zur Definition dieser beiden ESR-Parameter zu verwenden, geht auf van Vleck zurück [106], und zwar bevor die Theorie der linearen Antwort entwickelt wurde [58, 101]. Seine Idee wird in der vorliegenden Arbeit mittels dieser Theorie auf endliche Temperaturen erweitert. Im Grenzfall unendlich hoher Temperatur werden die Resultate von van Vleck reproduziert (siehe Anhang B.5).

Damit die auf diese Weise definierten ESR-Parameter als Verschiebung und Breite der Resonanzkurve interpretiert werden können, ist es gemäß der Abschnitte 2.3.2–2.3.4 notwendig, dass die absorbierte Intensität eine Ein-Peak-Struktur besitzt, d. h. dass sie als Verteilung näherungsweise unimodal ist. Inwieweit die Linienformen der in dieser Arbeit untersuchten XXZ-Kette hiervon abweichen, wird in späteren Kapiteln in den jeweiligen Grenzfällen numerisch untersucht. Beispielsweise sind die Linienformen im Ising-Limes und am Punkt freier Fermionen für tiefe Temperaturen tri- bzw. bimodal.

Wie im Folgenden gezeigt wird, hängen die Linienform und damit natürlich auch die Werte der ESR-Parameter entscheidend davon ab, ob die absorbierte Intensität

$$I(\omega, h) = \frac{\omega}{2} \chi''_{+-}(\omega, h) \quad \text{mit} \quad (4.1a)$$

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt \quad (4.1b)$$

als Funktion der Frequenz ω der eingestrahlten, zirkular polarisierten Mikrowelle aufgefasst wird und die Stärke h des homogenen Magnetfeldes einen festen Wert besitzt, oder umgekehrt. Entsprechend wird $I(\omega, h)$ durch das Integral (2.35) bzw. (2.37) normiert, und die Momente der Verteilung werden durch Integrale über ω bzw. h definiert. Die beiden Fälle werden im Folgenden unterschieden und kurz mit „ ω -Richtung“ bzw. „ h -Richtung“ bezeichnet. Für den Fall der ω - bzw. h -Richtung hängen die Momente parametrisch von h bzw. ω ab.

4.1 Magnetfeldabhängige Momente

Der Fall der magnetfeldabhängigen Momente entspricht der experimentell eher untypischen Situation (siehe Abschnitt 2.1), in der das statische homogene Magnetfeld einen festen Wert besitzt und die Frequenz der eingestrahlten Welle variiert wird. Wie in diesem Abschnitt aber gezeigt wird, ist dieser Fall für eine theoretische Beschreibung gut geeignet, weil die Momente durch kurzreichweitige Korrelationsfunktionen ausgedrückt werden können.

Zur Bestimmung der ESR-Parameter sind die niedrigsten Momente ausreichend, so dass nur Korrelationsfunktionen mit bis zu vier Gitterplätzen berechnet werden müssen. Wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, können diese und damit die ESR-Parameter für den Fall der integrierbaren XXZ-Kette exakt berechnet werden.

4.1.1 Definition und Berechnung

Für die folgenden Definitionen wird zunächst angenommen, dass die Systemgröße L endlich ist. Dann ist das Spektrum des Hamiltonoperators $H = H_M + H_Z$ mit dem modellspezifischen Hamiltonoperator H_M und dem Zeeman-Term $H_Z = -hS^z$ beschränkt, und die Integrale

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n I(\omega, h) d\omega \quad (4.2)$$

existieren für alle nichtnegativen Zahlen n . Sie werden magnetfeldabhängige Momente der absorbierten Intensität $I(\omega, h)$ genannt. Es bietet sich an, eine weitere Folge von Integralen zu definieren,

$$m_n(T, h) = \frac{J^{-n}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - h)^n \chi''_{+-}(\omega, h) d\omega. \quad (4.3)$$

Hierbei sei mit J die Energieskala des Hamiltonoperators H_M bezeichnet. Die dimensionslosen Größen m_n werden als (verschobene) Momente der dynamischen Suszeptibilität $\chi''_{+-}(\omega, h)$ bezeichnet. Sie hängen parametrisch von der Stärke h des Magnetfeldes und der Temperatur T ab, wobei im weiteren Verlauf diese Abhängigkeit nicht immer explizit angegeben wird. Zwischen den Momenten I_n von I und den verschobenen Momenten m_n von χ''_{+-} besteht der Zusammenhang

$$I_{n-1} = \pi \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} h^{n-k} J^k m_k, \quad (4.4)$$

was mit Gleichung (4.1a) sowie den Definitionen (4.2) und (4.3) leicht nachgerechnet werden kann.

Die Resonanzverschiebung $\delta\omega = \langle\omega\rangle - h$ und die Linienbreite $\Delta\omega = \sqrt{\Delta\omega^2} = \sqrt{\langle\omega^2\rangle - \langle\omega\rangle^2}$ der absorbierten Intensität $I(\omega, h)$ aus den Abschnitten 2.3.3 und 2.3.4 werden nun mit Hilfe der Momente I_n definiert und unter Benutzung von (4.4) über die Momente m_n ausgedrückt,

$$\frac{\delta\omega}{J} = \frac{1}{J} \left(\frac{I_1}{I_0} - h \right) = \frac{Jm_2 + hm_1}{Jm_1 + hm_0}, \quad (4.5a)$$

$$\frac{\Delta\omega^2}{J^2} = \frac{1}{J^2} \left(\frac{I_2}{I_0} - \frac{I_1^2}{I_0^2} \right) = \frac{Jm_3 + hm_2}{Jm_1 + hm_0} - \left(\frac{\delta\omega}{J} \right)^2. \quad (4.5b)$$

Zu ihrer Bestimmung sind folglich die ersten vier Momente $m_{n \leq 3}$ ausreichend.

Die Momente m_n können durch kurzreichweitige Korrelationsfunktionen ausgedrückt werden. Hierfür wird Definition (4.1b) der dynamischen Suszeptibilität χ''_{+-} in Definition (4.3) eingesetzt, n -mal partiell integriert, wobei die Oberflächenterme wegen der Endlichkeit von L verschwinden,

und schließlich die Darstellung $\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk / 2\pi$ der δ -Funktion benutzt,

$$\begin{aligned}
 m_n(T, h) &= \frac{J^{-n}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - h)^n \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt d\omega \\
 &= \frac{J^{-n}}{4\pi L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{(\omega - h)^n e^{i(\omega-h)t}}_{=(-i\partial_t)^n e^{i(\omega-h)t}} e^{iht} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt d\omega \\
 &= \frac{(-1)^n J^{-n}}{4\pi L} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-h)t} d\omega}_{=2\pi\delta(t)} (-i\partial_t)^n \left(e^{iht} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T \right) dt \\
 &= \frac{(-1)^n}{2L} \left(-\frac{i\partial_t}{J} \right)^n \left(e^{iht} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T \right) \Big|_{t=0}. \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

Sowohl die Zeitabhängigkeit des Aufsteigers S^+ als auch der thermische Erwartungswert $\langle \cdot \rangle_T$ sind gemäß Gleichungen (2.27a) und (2.27b) mit dem Hamiltonoperator $H = H_M - hS^z$ zu berechnen. In Anhang B.1 wird gezeigt, dass die ersten vier Momente $m_{n \leq 3}$ mit $H' = H_M/J$ gegeben sind durch

$$m_0 = \frac{1}{2L} \langle [S^+, S^-] \rangle_T = \frac{1}{L} \langle S^z \rangle_T, \tag{4.7a}$$

$$m_1 = \frac{1}{2L} \langle [S^+, [H', S^-]] \rangle_T, \tag{4.7b}$$

$$m_2 = \frac{1}{2L} \langle [[S^+, H'], [H', S^-]] \rangle_T, \tag{4.7c}$$

$$m_3 = \frac{1}{2L} \left(\langle [[S^+, H'], [H', [H', S^-]]] \rangle_T - \frac{h}{J} \langle [[S^+, H'], [[S^z, H'], S^-]] \rangle_T \right). \tag{4.7d}$$

Das nullte Moment m_0 beschreibt die Magnetisierung pro Gitterplatz, wohingegen die höheren Momente keine so einfache Interpretation besitzen. Sie sind gegeben durch statische Korrelationsfunktionen, deren Komplexität mit größer werdendem Index n stark zunimmt. Insbesondere existiert der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ und die Korrelationsfunktionen nehmen endliche Werte an. Eine interessante Folgerung hieraus ist, dass die Momente I_n gemäß Gleichung (4.4) existieren und damit $\omega^n I(\omega, h)$ für jedes feste n schnell genug auf Null abfallen muss. Damit kann die Verteilung keine *heavy tails* besitzen, so wie es z. B. bei der Cauchy-Lorentz-Verteilung (A.28) der Fall ist. Tatsächlich deuten die numerischen Berechnungen für die endliche XXZ-Kette darauf hin, dass die absorbierte Intensität exponentiell abfällt (siehe z. B. Abbildung 6.2).

Falls für das betrachtete Modell $[H_M, S^z] = 0$ gilt, vereinfacht sich die Zeitabhängigkeit des Aufsteigers S^+ aus Gleichung (4.6) ähnlich wie in (A.5) oder (A.8) zu

$$S^+(t) = e^{it \text{ad}_H}(S^+) = e^{it(\text{ad}_{H_M} - h \text{ad}_{S^z})}(S^+) = e^{-iht} e^{it \text{ad}_{H_M}}(S^+). \tag{4.8}$$

Damit folgt, dass die n -fache Ableitung $(-i\partial_t/J)^n$ in Gleichung (4.6) bei $t = 0$ zu $\text{ad}_{H'}^n$ mit $H' = H_M/J$ wird. Die adjungierte Wirkung $\text{ad}_{H'}$ in dem Erwartungswert $\langle [\text{ad}_{H'}^n(S^+), S^-] \rangle_T$ kann wegen der zyklischen Invarianz der Spur auf den Absteiger S^- übertragen werden, wobei jedesmal ein Minuszeichen hinzukommt. Es ergibt sich somit für alle Momente $m_{n \geq 0}$ das Resultat

$$m_n = \frac{1}{2L} \langle [S^+, \text{ad}_{H'}^n(S^-)] \rangle_T \quad \text{mit} \quad H' = H_M/J. \tag{4.9}$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass Gleichung (4.6) für beliebige modellspezifische Hamiltonoperatoren $H_M = JH'$ und Gleichung (4.9) für Hamiltonoperatoren mit $[H_M, S^z] = 0$ gelten, und dass insbesondere keine Einschränkung an die Dimension des Spinsystems gestellt wurde. Allerdings können die Korrelationsfunktionen, die sich aus (4.6) oder (4.9) ergeben, für drei-, zwei- oder sogar eindimensionale Spinsysteme im Allgemeinen nicht berechnet werden. Selbst für integrable Spinketten ist dies nicht immer möglich. Eine Ausnahme bildet hierbei die integrable XXZ-Kette.

4.1.2 Exakte Berechnung der Momente für die XXZ-Kette

Der dimensionslose Hamiltonoperator $H' = H_M/J$ lautet für die XXZ-Kette aus Kapitel (3)

$$H' = H_{XXZ}/J = \sum_{j=1}^L \left(s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y + (1 + \delta) s_j^z s_{j+1}^z \right). \quad (4.10)$$

Die ersten vier Momente $m_{n \leq 3}$ können für dieses Modell explizit berechnet werden, wobei die technischen Details hierzu in Anhang B.2 zu finden sind,

$$m_0 = \langle s_1^z \rangle_T, \quad (4.11a)$$

$$m_1 = \delta \langle s_1^+ s_2^- - 2s_1^z s_2^z \rangle_T, \quad (4.11b)$$

$$m_2 = \frac{\delta^2}{2} \langle s_1^z + 4s_1^z s_2^z s_3^z - 4s_1^z s_2^+ s_3^- \rangle_T, \quad (4.11c)$$

$$m_3 = \frac{\delta^2}{4} \langle 2s_1^+ s_2^+ s_3^- s_4^- + 4s_1^+ s_2^- s_3^+ s_4^- - 2s_1^+ s_2^- s_3^- s_4^+ \\ - 8s_1^z s_2^z s_3^+ s_4^- - 4s_1^z s_2^+ s_3^z s_4^- + 8s_1^z s_2^+ s_3^- s_4^z - 4s_1^+ s_2^- - s_1^+ s_3^- \\ + 8s_1^z s_2^z s_3^z s_4^z + 2s_1^z s_3^z - 4s_1^z s_2^z + \delta(8s_1^z s_2^+ s_3^- s_4^z + 2s_1^+ s_2^- - 8s_1^z s_2^z) \rangle_T. \quad (4.11d)$$

Wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, können die hier auftretenden Korrelationsfunktionen exakt berechnet werden. Mit der Parametrisierung $\delta = (q - 1)^2/2q$ und der Notation (3.11) folgt [20]

$$m_0 = -\frac{1}{2}\varphi(0), \\ m_1 = \frac{(q-1)^2(q^2+4q+1)\omega'_{(0,1)}}{16q^2} - \frac{(q^3-1)\omega_{(0,0)}}{4q(q+1)}, \quad (4.12) \\ m_2 = \frac{(q-1)^2}{256q^4} [4q(q+1)(q^3-1)(\omega_{(0,2)}\varphi(0) - 2\omega_{(1,1)}\varphi(0) - \omega_{(0,0)}\varphi(2)) \\ + (q^2-1)^2(q^2+4q+1)(\omega'_{(1,2)}\varphi(0) + \omega'_{(0,1)}\varphi(2)) - 16q^2(q-1)^2\varphi(0)], \\ m_3 = \frac{(q-1)^4}{98304q^8(q^4-1)(q^6-1)} [192q^4(q^2-1)^2(q^4-1)(q^6+18q^4+8q^3+18q^2+1)\omega_{(0,2)} \\ - 1536q^5(q^4-1)(4q^8-9q^7-2q^6-6q^5+8q^4-6q^3-2q^2-9q+4)\omega_{(0,0)} \\ + 64q^2(q^2-1)^2(q^4-1)(q+1)^2(2q^8-5q^7+26q^6-49q^5+28q^4 \\ - 49q^3+26q^2-5q+2)\omega_{(1,1)} \\ - 16q^2(q^2-1)^2(q^4-1)(q+1)^2(q^8-q^7+q^6+q^5+2q^4 \\ + q^3+q^2-q+1)(2\omega_{(1,3)}-3\omega_{(2,2)})]$$

$$\begin{aligned}
 & + 64q^2(q^2 - 1)^4(2q^{10} - q^9 + 4q^8 - 4q^7 - 12q^6 - 14q^5 \\
 & \quad - 12q^4 - 4q^3 + 4q^2 - q + 2)\omega_{(0,0)}\omega_{(1,1)} \\
 & - 16q^2(q + 1)^2(q^{16} - q^{15} + 8q^{14} + 9q^{13} + 47q^{12} + 45q^{11} + 96q^{10} + 91q^9 \\
 & \quad + 128q^8 + 91q^7 + 96q^6 + 45q^5 + 47q^4 + 9q^3 + 8q^2 - q + 1) \\
 & \quad \times (3\omega_{(0,2)}^2 - 6\omega_{(1,1)}\omega_{(0,2)} + 2\omega_{(0,0)}\omega_{(1,3)} - 3\omega_{(0,0)}\omega_{(2,2)}) \\
 & + 64q^2(q^4 - 1)(q^6 - 1)(3q^8 + 2q^6 + 24q^5 - 130q^4 + 24q^3 + 2q^2 + 3)\omega'_{(0,1)} \\
 & - 16q^2(q^2 - 1)^2(q^4 - 1)(q^6 - 1)(3q^4 + 14q^2 + 3)\omega'_{(0,3)} \\
 & + 8q^2(q^2 - 1)(q^4 - 1)^2(q^6 - 1)(q + 1)^2(8\omega'_{(1,2)} - \omega'_{(2,3)}) \\
 & + (q^4 - 1)(q^6 - 1)(q + 1)^2(q^{10} - 2q^9 + 25q^8 + 16q^7 + 118q^6 + 164q^5 \\
 & \quad + 118q^4 + 16q^3 + 25q^2 - 2q + 1)(\omega'_{(0,3)}\omega'_{(1,2)} + \omega'_{(0,1)}\omega'_{(2,3)}) \\
 & + 16q^2(q^2 - 1)^3(q^4 - 1)(q^6 - 1)(q^2 + 4q + 1)(\omega_{(0,2)}\omega'_{(0,1)} + \omega_{(0,0)}\omega'_{(1,2)}) \\
 & + 4q^2(q^6 - 1)(q + 1)^2(q^2 + 1)(5q^8 - 2q^7 + 32q^6 + 50q^5 + 70q^4 + 50q^3 + 32q^2 - 2q + 5) \\
 & \quad \times (2\omega_{(1,3)}\omega'_{(0,1)} - 3\omega_{(2,2)}\omega'_{(0,1)} + \omega_{(0,2)}\omega'_{(0,3)} - 2\omega_{(1,1)}\omega'_{(0,3)} - 3\omega_{(0,2)}\omega'_{(1,2)} - \omega_{(0,0)}\omega'_{(2,3)})].
 \end{aligned}$$

Dies sind die Momente im thermodynamischen Limes. Sie können für alle Temperaturen T , Magnetfelder h und Anisotropieparameter δ berechnet werden. Hierbei müssen der kritische Bereich $\delta < 0$ und der massive Bereich $\delta > 0$ unterschieden werden (siehe Abschnitt 3.2). Werte von δ in der Nähe des isotropen Punkts $\delta = 0$ sind relevant für reale Materialien (siehe Tabelle 3.1).

In Abbildung 4.1 sind die Resonanzverschiebung $\delta\omega$ und die Linienbreite $\Delta\omega$ für zwei Beispiele in der Nähe des isotropen Punktes gezeigt, und zwar für $\delta = -0.1$ im kritischen und für $\delta = 0.25$ im massiven Bereich.

Für $\delta = -0.1$ steigen beide ESR-Parameter mit kleiner werdender Temperatur monoton an, ähnlich wie die Linienbreite für $\delta = 0.25$. Für andere Werte des Anisotropieparameters im kritischen Bereich $-1 \leq \delta < 0$ zeigen die ESR-Parameter ein qualitativ ähnliches Verhalten (hier nicht dargestellt). Im massiven Bereich hingegen verhält sich die Resonanzverschiebung als Funktion der Temperatur für kleine Magnetfelder nichtmonoton ($\delta = 0.25$ und $h = 0.1J$ im rechten oberen Diagramm von Abbildung 4.1). Für beide Bereiche gilt, dass sich die Resonanzkurve mit sinkender Temperatur verbreitert. Dies ist interessant, weil es experimentellen Daten zu widersprechen scheint [56]. Diese Diskrepanz lässt sich allerdings einfach erklären. Sie beruht auf den verschiedenen Maßen für die Linienbreite, wie sie in Abschnitt 2.3.4 eingeführt wurden. Während in Abbildung 4.1 die Linienbreite über die mittlere quadratische Abweichung bestimmt wurde, wird in der experimentellen Literatur häufig die *Peak-to-Peak*-Breite verwendet.

Weiterhin sind in Abbildung 4.1 die ESR-Parameter $\delta\omega$ und $\Delta\omega$ als Funktion des Magnetfeldes für verschiedene Temperaturen dargestellt. Die Resonanzverschiebung geht für $h \rightarrow 0$ linear gegen Null, wohingegen die Linienbreite endlich bleibt. Der genaue Wert hängt dabei von der jeweiligen Temperatur ab (vergleiche hierzu das Diagramm für die Linienbreite als Funktion der Temperatur für das kleinste Magnetfeld $h = 0.1J$). Für große Magnetfelder werden die Resonanzkurven wegen $\Delta\omega \rightarrow 0$ sehr schmal.

In Abbildung 4.2 ist die Linienbreite $\Delta\omega$ als Funktion des Anisotropieparameters $\Delta = 1 + \delta$ für verschiedene Magnetfelder h und Temperaturen T dargestellt. Auffällig ist, dass im Diagramm oben links für $h = 0$ die Linienbreite, definiert über Gleichung (4.5b), im Limes $\Delta \rightarrow 1$ ungleich Null ist, obwohl die absorbierte Intensität für $\Delta \rightarrow 1$ immer schmäler und im isotropen Limes

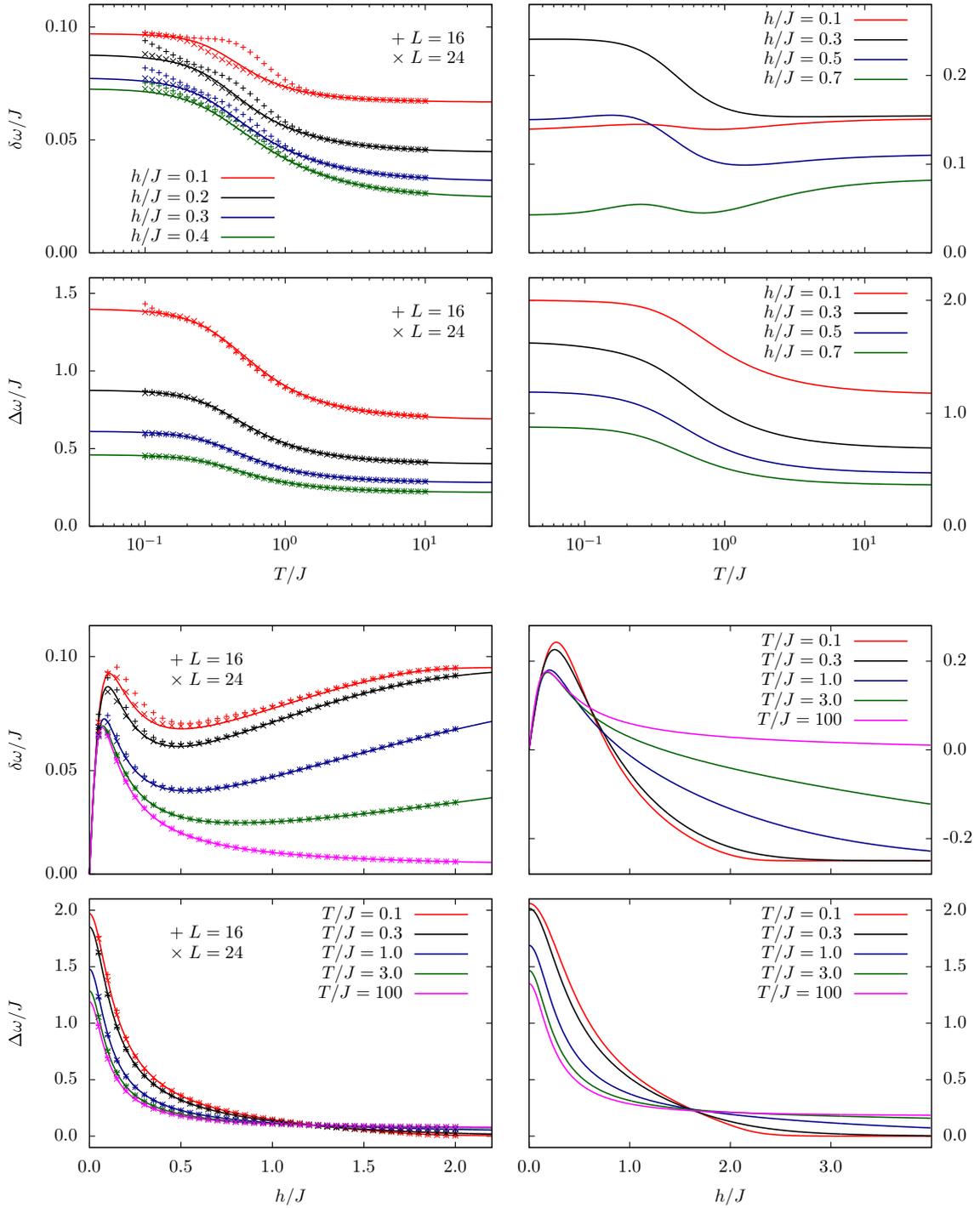


Abb. 4.1: Resonanzverschiebung $\delta\omega/J$ und Linienbreite $\Delta\omega/J$ als Funktion der Temperatur für verschiedene Magnetfelder (oben) und als Funktion des Magnetfeldes für verschiedene Temperaturen (unten) im kritischen Bereich bei $\delta = -0.1$ (links) und im massiven Bereich bei $\delta = 0.25$ (rechts). Die Kreuze stellen die Ergebnisse unabhängiger numerischer Rechnungen für Ketten der Länge 16 und 24 dar.

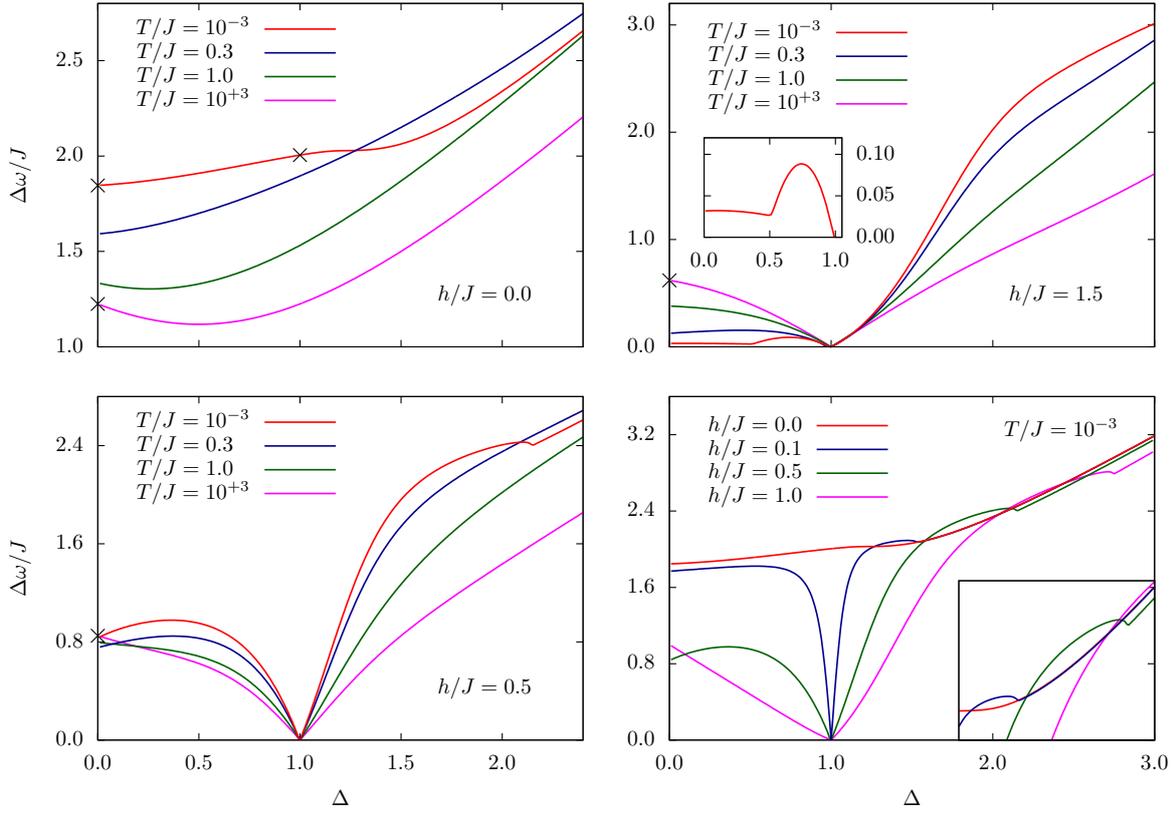


Abb. 4.2: Linienbreite $\Delta\omega/J$ als Funktion des Anisotropieparameters für verschiedene Magnetfelder h und Temperaturen T . Die schwarzen Kreuze markieren die Werte der Linienbreite aus den Gleichungen (6.4) und (7.36).

zur δ -Funktion (2.28) wird. Der Grenzwert der Linienbreite bleibt endlich, weil der Vorfaktor der δ -Funktion für $h = 0$ und $\delta \rightarrow 0$ verschwindet. Die Linienbreite kann am isotropen Punkt stetig fortgesetzt werden. Für die umgekehrte Reihenfolge der Limites $\delta \rightarrow 0$ und $h \rightarrow 0$ ergibt sich eine verschwindende Linienbreite $\Delta\omega$. Dies zeigt, dass diese beiden Grenzübergänge nicht miteinander vertauscht werden dürfen. Der Fall $h = 0$ stellt einen Spezialfall dar. Für jedes $h > 0$ geht die Linienbreite im isotropen Limes, wie zu erwarten, gegen Null. Dass sie sich im Limes $h \rightarrow 0$ wieder der Kurve für $h = 0$ annähert, kann im Diagramm unten rechts beobachtet werden.

Ein weiteres interessantes Verhalten der Linienbreite ist für tiefe Temperaturen ($T = 10^{-3}J$) zu erkennen. Die Kurven der Linienbreiten als Funktion von Δ weisen an gewissen Stellen Knicke auf. Diese können mit dem Phasendiagramm aus Abbildung 3.1 erklärt werden. Für $h/J = 1.5$ liegt z. B. ein Phasenübergang bei $\Delta = 0.5$ vor (siehe Diagramm oben rechts) und für jeden Wert von $h > 0$ gibt es gemäß Gleichung (3.6) einen Phasenübergang beim zugehörigen Wert $\Delta > 1$. Jeder dieser Phasenübergänge ist von zweiter Ordnung.

Weiterhin kann Abbildung 4.2 entnommen werden, dass die Linienbreite $\Delta\omega$ für $h \neq 0$ linear mit $\delta = \Delta - 1$ gegen Null geht für $\delta \rightarrow 0$. Dies scheint dem Ergebnis (2.48) von Oshikawa und Affleck zu widersprechen [89], die eine Linienbreite proportional zu δ^2 vorhersagen. Diese Diskrepanz erklärt sich durch die unterschiedlichen Maße der Linienbreite (siehe Abschnitt 2.3.4).

4.2 Frequenzabhängige Momente

Für den Fall der h -Richtung hängen die Momente parametrisch von ω ab und werden deswegen auch als frequenzabhängige Momente bezeichnet. Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, korrespondiert die h -Richtung im Gegensatz zur ω -Richtung eher zu ESR-Experimenten, weil in diesen häufig die Frequenz festgehalten und das äußere homogene Magnetfeld langsam verändert wird. Allerdings ist die h -Richtung für eine theoretische Beschreibung weniger gut geeignet. Dies liegt daran, dass die Momente der absorbierten Intensität durch Reihen gegeben sind, in deren Summanden Korrelationsfunktionen beliebiger Reichweite vorkommen und die deswegen nicht berechnet werden können. Nichtsdestoweniger dienen diese Reihen als Startpunkt für systematische Entwicklungen. So können beispielsweise für die XXZ-Kette (4.10) sowohl eine Hochtemperatur-Entwicklung als auch eine Entwicklung für kleine Anisotropieparameter δ durchgeführt werden.

Letztere stellt zwischen den Resonanzverschiebungen in ω - und h -Richtung eine Beziehung her, die in der Literatur benutzt wird (siehe [69] und Zitate darin), um experimentelle Daten mit theoretischen Resultaten zu vergleichen. Diese Beziehung gilt allerdings nur, wenn die Anisotropie klein und damit die Resonanzkurve sehr scharf ist. Weiter entfernt vom isotropen Punkt ist die Kurve stark verbreitert und verschoben, und die Resonanzverschiebungen können nicht mehr miteinander identifiziert werden.

Die Linienbreiten der ω - und h -Richtung sind selbst in der Nähe des isotropen Punktes verschieden, insbesondere bei tiefen Temperaturen.

4.2.1 Definition und Berechnung

In Analogie zu (4.3) werden die frequenzabhängigen Momente wie folgt definiert

$$M_n(T, \omega) = \frac{J^{-n}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (h - \omega)^n \chi''_{+-}(\omega, h) dh. \quad (4.13)$$

Die Resonanzverschiebung $\delta h = \langle h \rangle - \omega$ und die Linienbreite $\Delta h = \sqrt{\Delta h^2} = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2}$ der absorbierten Intensität $I(\omega, h)$ aus den Abschnitten 2.3.3 und 2.3.4 sind durch die Momente M_n bestimmt,

$$\frac{\delta h}{J} = \frac{M_1}{M_0}, \quad \frac{\Delta h^2}{J^2} = \frac{M_2}{M_0} - \frac{M_1^2}{M_0^2}. \quad (4.14)$$

Die Momente M_n wiederum können durch die verschobenen Momente m_n und ihre Ableitungen ausgedrückt werden,

$$M_n(T, \omega) = (-1)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-J)^k}{k!} m_{k+n}^{(k)}(T, \omega). \quad (4.15)$$

Die Rechnung hierzu ist in Anhang B.3 zu finden. Gleichung (4.15) gilt für beliebige Hamiltonoperatoren H' , wobei die Momente m_n durch die allgemeine Formel (4.6) gegeben sind. Der obere Index (k) bezeichnet die k -te Ableitung bezüglich des zweiten Arguments. Im weiteren Verlauf wird Formel (4.15) für den Spezialfall der XXZ-Kette untersucht, weil für diese die Momente m_n exakt berechnet werden können, wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde.

Allerdings beinhaltet die Darstellung der Momente M_n , Gleichung (4.15), Korrelationsfunktionen mit beliebig großem Abstand, deren exakte Berechnung für die XXZ-Kette theoretisch zwar möglich ist, praktisch allerdings an der Komplexität der Terme scheitert. Wenn hingegen

ein Abbrechen der Reihe nach wenigen Termen gerechtfertigt ist, liefert (4.15) eine auswertbare Näherungslösung für die Momente M_n , weil dann nur die niedrigsten Momente $m_{n \leq 3}$ benötigt werden. Es gibt mindestens zwei Fälle, in denen systematische Näherungen für δh bzw. Δh angegeben werden können. Diese werden in den beiden nächsten Abschnitten betrachtet.

4.2.2 Entwicklung für kleine Anisotropien

Für kleine Anisotropien δ kann der Hamiltonoperator H' aus Gleichung (4.10) in den $SU(2)$ -symmetrischen Anteil $H_{SU(2)} = \sum_{j=1}^L \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ und die kleine Störung $H_\delta = \delta \sum_{j=1}^L s_j^z s_{j+1}^z$ aufgespalten werden. Der Kommutator $[H', S^\pm]$ in den Gleichungen (4.7) vereinfacht sich damit zu $[H_\delta, S^\pm]$, der wiederum von linearer Ordnung in δ ist. Die Anzahl solcher Kommutatoren in dem Ausdruck für das jeweilige m_n legt somit die Ordnung in δ fest. Das bedeutet, dass m_0 , m_1 bzw. m_2 mindestens von der Ordnung 1, δ bzw. δ^2 sind. Diese Systematik setzt sich allerdings für die höheren Momente $m_{n \geq 3}$ nicht weiter fort. Es gilt vielmehr, dass alle $m_{n \geq 3}$ nur von der Ordnung δ^2 sind, wie die Rechnung aus Anhang B.1, die zu Gleichung (4.7d) führt, exemplarisch zeigt. Diese Abschätzungen gelten im Übrigen nicht nur für die XXZ-Kette, sondern auch für allgemeinere Hamiltonoperatoren $H' = H_M/J$, sofern diese sich in einen $SU(2)$ -invarianten Anteil $H_{SU(2)}$ mit einer kleinen Störung H_δ zerlegen lassen, $H' = H_{SU(2)} + H_\delta$.

Die Ordnungen von m_0 , m_1 und m_2 übertragen sich gemäß Gleichung (4.15) auf die Momente M_0 , M_1 und M_2 . Das Problem bei M_2 besteht allerdings darin, dass alle Terme in der Reihe (4.15) nur durch $\mathcal{O}(\delta^2)$ abgeschätzt werden können, was eine systematische Entwicklung von M_2 und damit auch von der Linienbreite Δh in diesem Zugang unmöglich macht. Für die beiden anderen Momente gilt

$$M_0 = m_0 + \mathcal{O}(\delta), \quad M_1 = -m_1 + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (4.16)$$

Da im Allgemeinen m_1 selbst von linearer Ordnung in δ ist, folgt für die Resonanzverschiebung

$$\frac{\delta h}{J} = -\frac{m_1}{m_0} + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (4.17)$$

Diese Näherung ist für beliebige Hamiltonoperatoren $H' = H_{SU(2)} + H_\delta$ mit kleiner Störung H_δ gültig und führt zu Resultaten, die gut zu experimentellen Daten passen [69]. In den Arbeiten [69] und [81] wird diese Gleichung eher intuitiv begründet. Bei der Interpretation von (4.17) ist allerdings Vorsicht geboten, weil z. B. für die XXZ-Kette bei $h = 0$ die Größe m_1/δ gemäß Gleichung (4.11b) für $\delta = 0$ aus Symmetriegründen verschwinden muss. Das bedeutet, dass das erste Moment in der Form $m_1 = \delta(ah + bJ\delta + \dots)$ mit geeigneten Koeffizienten a und b ausgedrückt werden kann. Um also für reale Werte von δ die Resonanzverschiebung als eine Größe von erster Ordnung in δ interpretieren zu können, muss $ah \gg bJ\delta$ gelten. In diesem Grenzfall wiederum reduziert sich Formel (4.5a) für die Resonanzverschiebung in ω -Richtung auf $\delta\omega/J = m_1/m_0$. Damit gilt im Grenzfall kleiner Anisotropien und großer Magnetfelder

$$\delta\omega(T, h) = -\delta h(T, \omega)|_{\omega=h} \quad \text{für} \quad |J\delta| \ll J, h. \quad (4.18)$$

Dieser Zusammenhang zwischen den Resonanzverschiebungen in ω - und h -Richtung wird dazu verwendet, in h -Richtung gemessene experimentelle Ergebnisse mit theoretischen Vorhersagen in ω -Richtung zu vergleichen [68, 89]. Dahingegen ist ein Vergleich zwischen den Linienbreiten der beiden Richtungen, wie hier gezeigt wurde, nicht ohne weitere Annahmen zulässig.

Eine zweite messbare Größe, die eine systematische Entwicklung für kleine Anisotropien erlaubt, stellt die integrierte Intensität dar [104], also das in Abschnitt 2.3.1 eingeführte Normierungsintegral \tilde{I}_0 der absorbierten Intensität. Dieses kann durch das nullte Moment ausgedrückt werden, und die Entwicklung lautet damit

$$\tilde{I}_0 = \pi\omega M_0 = \pi\omega (m_0 - Jm'_1 + \mathcal{O}(\delta^2)) . \quad (4.19)$$

Hierbei sind in der Abschätzung $\mathcal{O}(\delta^2)$ alle Summanden der Reihe (4.15) mit $k \geq 2$ enthalten.

Gleichung (4.19) gilt auch im paramagnetischen Bereich, in dem die Spinkopplungen J und $J\delta$ beide klein gegenüber der Frequenz ω und dem Resonanzfeld $h \approx \omega$ sind. In niedrigster Ordnung kann selbst der Term $-Jm'_1$ vernachlässigt werden und die integrierte Intensität ist proportional zur Magnetisierung $m(T, h)|_{h=\omega}$.

4.2.3 Hochtemperaturentwicklung für die XXZ-Kette

Es wird nun die XXZ-Kette im longitudinalen Magnetfeld betrachtet, deren dimensionsloser Hamiltonoperator durch

$$\tilde{H} = H' - \frac{h}{J}S^z = \sum_{j=1}^L \left(s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y + (1 + \delta) s_j^z s_{j+1}^z \right) - \frac{h}{J}S^z \quad (4.20)$$

gegeben ist. Die Reihe (4.15) stellt, neben dem Fall kleiner Anisotropien, auch den Ausgangspunkt für eine Hochtemperaturentwicklung dar. Jede Ableitung $J\partial_h$ der Momente $m_n(T, h)$ liefert aufgrund der Struktur der Erwartungswerte bzw. des statistischen Operators $\rho_0 = \frac{1}{Z} \exp(-\frac{J}{T}\tilde{H})$ wegen $[\tilde{H}, S^z] = 0$ den Faktor $\frac{J}{T}S^z$. Für hohe Temperaturen $T \gg J$ kann die Reihe (4.15) demzufolge in guter Näherung nach wenigen Termen abgebrochen werden. Hierbei ist noch zu beachten, dass sie keine systematische Entwicklung in den Potenzen von J/T darstellt, weil die Koeffizienten selbst noch von T abhängen.

Es soll nun die systematische Hochtemperaturentwicklung der Linienbreite $\Delta h/J$ aus Gleichung (4.14) bis zur zweiten Ordnung in $\epsilon := \max(J, \omega)/T$ bestimmt werden. In Anhang B.4 wird gezeigt, dass sämtliche konstanten Terme der Hochtemperaturentwicklungen von $M_{n \leq 2}$ verschwinden. Damit müssen die Momente $M_0(T, \omega)$ und $M_2(T, \omega)$ einschließlich bis zur dritten Ordnung in ϵ berechnet werden. Für $M_1(T, \omega)$ ergibt sich die Besonderheit, dass neben dem konstanten Term auch noch der lineare Term in ϵ verschwindet. Demnach muss das erste Moment M_1 nur bis zur zweiten Ordnung entwickelt werden, weil es in die Linienbreite durch den Term $(M_1/M_0)^2$ eingeht und M_0 von führender erster Ordnung ist.

Die Hochtemperaturentwicklungen der Momente $M_{n \leq 2}$ werden in Anhang B.4 bestimmt und lauten

$$M_0 = \frac{\omega}{4T} \left(1 - \frac{(1 - \delta)J}{2T} - \frac{\delta(4 + \delta)J^2}{8T^2} - \frac{\omega^2}{12T^2} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^4), \quad (4.21a)$$

$$M_1 = \frac{\omega^2 \delta}{8T^2} + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (4.21b)$$

$$M_2 = \frac{\omega \delta^2}{8T} \left(1 + \frac{\delta J}{T} - \frac{(3\delta^2 + 16\delta + 12)J^2}{16T^2} + \frac{\omega^2}{6T^2} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^4). \quad (4.21c)$$

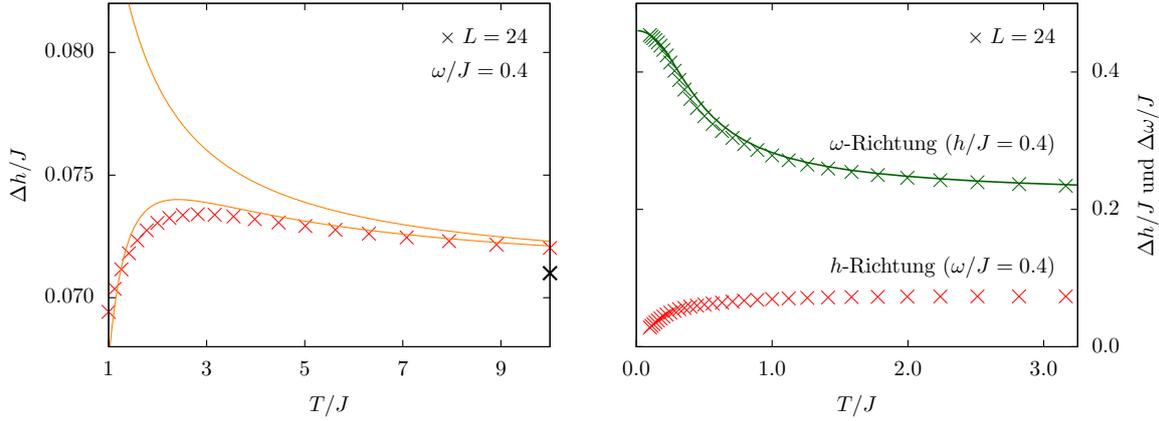


Abb. 4.3: Linienbreiten $\Delta\omega/J$ (grün) und $\Delta h/J$ (rot) als Funktion der Temperatur im kritischen Bereich bei $\delta = -0.1$. Die farbigen Kreuze stellen die Ergebnisse unabhängiger numerischer Rechnungen für eine Kettlänge von $L = 24$ dar. Das schwarze Kreuz kennzeichnet den Grenzwert $|\delta|/\sqrt{2}$ für unendlich hohe Temperatur. Die orangenen Linien sind die Hochtemperaturentwicklungen der Linienbreite $\Delta h/J$ gemäß Gleichung (4.22c) bis zur ersten Ordnung (obere Kurve) und bis zur zweiten Ordnung (untere Kurve) in J/T .

Die integrierte Intensität \tilde{I}_0 , die Resonanzverschiebung δh und die Linienbreite Δh ergeben sich damit zu

$$\tilde{I}_0 = \pi\omega M_0 = \frac{\pi\omega^2}{4T} \left(1 - \frac{(1-\delta)J}{2T} - \frac{\delta(4+\delta)J^2}{8T^2} - \frac{\omega^2}{12T^2} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^4), \quad (4.22a)$$

$$\frac{\delta h}{J} = \frac{M_1}{M_0} = \frac{\omega\delta}{2T} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (4.22b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta h^2}{J^2} &= \frac{M_2}{M_0} - \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^2 = \frac{\delta^2}{2} \left[1 + \frac{\delta J}{T} - \frac{(3\delta^2 + 16\delta + 12)J^2}{16T^2} + \frac{\omega^2}{12T^2} - \frac{\omega^2}{2T^2} \right] + \mathcal{O}(\epsilon^3) \\ \Rightarrow \frac{\Delta h}{J} &= \frac{|\delta|}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{(1+\delta)J}{4T} - \frac{(6\delta^2 + 10\delta + 9)J^2 + 4\omega^2}{32T^2} \right] + \mathcal{O}(\epsilon^3). \end{aligned} \quad (4.22c)$$

Die Hochtemperaturentwicklungen dieser drei Größen können unabhängig voneinander benutzt werden, um den Anisotropieparameter δ aus experimentellen Daten zu bestimmen. Die relativen Vorzeichen in der Hochtemperaturentwicklung der Linienbreite Δh besagen, dass diese als Funktion der Temperatur nichtmonoton ist, was durch numerische Rechnungen gestützt wird (siehe Abbildung 4.3).

Die Hochtemperaturentwicklungen der Linienbreite bis zur ersten und zweiten Ordnung sind im linken Diagramm der Abbildung 4.3 dargestellt. Analog zu der Linienbreite in ω -Richtung (grüne Kreuze im rechten Diagramm) steigt die Linienbreite Δh (rote Kreuze) für sinkende Temperatur von ihrem Grenzwert für unendlich hohe Temperatur, $\Delta h/J = |\delta|/\sqrt{2}$, leicht an. Allerdings zeigen die numerischen Daten der Linienbreite Δh , dass sie sich im Gegensatz zu der Linienbreite in ω -Richtung nichtmonoton verhält, ähnlich wie die Hochtemperaturentwicklung

bis zur zweiten Ordnung. Vielmehr scheint sie für tiefe Temperaturen $T < J$ linear auf Null abzufallen. Dieses qualitative Verhalten passt zu den feldtheoretischen Vorhersagen von Oshikawa und Affleck aus [89] sowie zu experimentellen Daten [2, 56].

Es muss an dieser Stelle betont werden, dass es zwischen der Verbreiterung in ω -Richtung und der Verengung in h -Richtung keinen Widerspruch gibt. Beide numerischen Datensätze basieren auf ein und demselben Datensatz für die dynamische Suszeptibilität. Die Werte für $\Delta\omega$ wurden gemäß Gleichung (4.5b) durch Integration in ω -Richtung und die für Δh gemäß (4.14) durch Integration in h -Richtung berechnet. Selbst für die Funktion $\chi''_{+-}(\omega, h)/\omega$ statt $I(\omega, h) = \omega\chi''_{+-}(\omega, h)/2$ bleibt die Linienbreite im Limes $T \rightarrow 0$ endlich (siehe Abbildung 5.3). Der qualitative Unterschied im Tieftemperaturverhalten der beiden Linienbreiten $\Delta\omega$ und Δh liegt also nicht am zusätzlichen Faktor ω^2 .

Die Werte für $\Delta\omega$ können mit der exakten Linienbreite verglichen werden (durchgezogene grüne Linie im rechten Diagramm). Dass die Kreuze mit dieser Linie fast deckungsgleich sind, erzeugt einerseits Vertrauen in die numerische Methode aus Kapitel 5 und zeigt andererseits, dass integrierte Größen für endliche Kettenlängen (hier $L = 24$) nur sehr kleine Abweichungen zu den exakten Ergebnissen im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ besitzen. Die *Finite-Size*-Korrekturen dieser integrierten Größen sind also sehr klein. Dies ist eine nichttriviale Aussage, weil in den numerischen Daten für die dynamische Suszeptibilität bei kleinen Temperaturen das *Finite-Size*-Spektrum deutlich zu erkennen ist (siehe Abbildungen 5.2, 7.4 und 7.5).

5 Numerische Berechnung der absorbierten Intensität für die XXZ-Kette

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird die in dieser Arbeit verwendete numerische Methode zur Bestimmung der absorbierten Intensität der XXZ-Kette endlicher Länge kurz vorgestellt. Details hierzu sind in den Arbeiten [109–111] von Weiße et al. zu finden. Es wird auf die Besonderheiten eingegangen, die für die Berechnung der dynamischen Suszeptibilität χ''_{+-} und speziell ihrer Momente auftreten.

Im zweiten Abschnitt werden Anwendungen dieser numerischen Methode anhand einiger Beispiele gezeigt.

5.1 Numerische Methode

Den Ausgangspunkt für die numerischen Rechnungen stellt die Spektraldarstellung (2.31) der dynamischen Suszeptibilität dar,

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{\pi}{LZ} \sum_{m,n} (e^{-E_n/T} - e^{-E_m/T}) |\langle m|S^-|n \rangle|^2 \delta(\omega - E_m + E_n). \quad (5.1)$$

Diese kann als Integral über den Boltzmann-Faktor $e^{-y/T}$ und eine von der Temperatur unabhängige Funktion s geschrieben werden (vergleiche Abschnitt III.D.1 in [111]),

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{\pi}{LZ} (1 - e^{-\omega/T}) \int_{-\infty}^{\infty} s(y + \omega, y) e^{-y/T} dy, \quad (5.2a)$$

$$s(x, y) = \sum_{m,n} |\langle m|S^-|n \rangle|^2 \delta(x - E_m) \delta(y - E_n). \quad (5.2b)$$

Zur numerischen Berechnung von s ist es zweckmäßig, zum einen alle auftretenden Energien so zu skalieren, dass sie die Form $\tilde{E} = aE + b$ mit $\tilde{E} \in [-1, 1]$ annehmen, und zum anderen $s(\tilde{x}, \tilde{y})$ in Chebyshev-Polynome erster Art zu entwickeln (siehe Abschnitt II.A in [111]),

$$s(\tilde{x}, \tilde{y}) = \sum_{i,j=0}^{\infty} \frac{\mu_{ij} (2 - \delta_{i0})(2 - \delta_{j0}) T_i(\tilde{x}) T_j(\tilde{y})}{\pi^2 \sqrt{(1 - \tilde{x}^2)} \sqrt{(1 - \tilde{y}^2)}}. \quad (5.3)$$

Die Chebyshev-Polynome T_j sind durch $T_{j+1}(x) = 2xT_j(x) - T_{j-1}(x)$ für alle $j \geq 1$ sowie $T_0(x) = 1$ und $T_1(x) = x$ rekursiv definiert. Es gilt die Relation [1]

$$T_j(x) T_k(x) = \frac{1}{2} (T_{j+k}(x) + T_{j-k}(x)), \quad \forall j \geq k \geq 0. \quad (5.4)$$

Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation

$$\langle T_i | T_j \rangle = \int_{-1}^1 \frac{T_i(x) T_j(x)}{\pi \sqrt{1 - x^2}} dx = \frac{\delta_{ij}}{2 - \delta_{j0}} \quad (5.5)$$

folgt für die Entwicklungskoeffizienten μ_{ij} durch Multiplikation von Gleichung (5.3) mit $T_i(\tilde{x})$ und $T_j(\tilde{y})$ sowie Integration über \tilde{x} und \tilde{y}

$$\mu_{ij} = \iint_{-1}^1 s(\tilde{x}, \tilde{y}) T_i(\tilde{x}) T_j(\tilde{y}) d\tilde{x} d\tilde{y} \stackrel{(5.2b)}{=} \text{Sp} \left\{ S^+ T_i(\tilde{H}) S^- T_j(\tilde{H}) \right\}, \quad (5.6)$$

wobei wegen der Skalierung $\tilde{H} = (H - b)/a$ gesetzt wurde. Für die XXZ-Kette ist hier der Hamiltonoperator H aus Gleichung (3.5) zu benutzen.

Um die Funktion s numerisch zu berechnen, wird die Entwicklung (5.3) nach M -vielen Termen abgebrochen. Die dabei auftretenden Gibbs-Oszillationen werden, wie in Abschnitt II.C von [111] beschrieben, durch Dämpfungsfaktoren g_i und g_j unterdrückt. Die Kombination aus diesen beiden Schritten ist äquivalent zu einer Faltung der Funktion s mit einem speziellen Kern und wird deswegen auch *kernel polynomial method* genannt. In den numerischen Berechnungen der vorliegenden Arbeit wurde durchgehend der sogenannte *Jackson kernel* benutzt. Hiermit lautet die Funktion s näherungsweise

$$s(\tilde{x}, \tilde{y}) \approx \sum_{i,j=0}^{M-1} \frac{\mu_{ij} g_i g_j (2 - \delta_{i0})(2 - \delta_{j0}) T_i(\tilde{x}) T_j(\tilde{y})}{\pi^2 \sqrt{(1 - \tilde{x}^2)(1 - \tilde{y}^2)}} \quad (5.7a)$$

$$\text{mit } g_j = \frac{(M - j + 1) \cos\left(\frac{\pi j}{M+1}\right) + \sin\left(\frac{\pi j}{M+1}\right) \text{ctg}\left(\frac{\pi}{M+1}\right)}{M + 1}. \quad (5.7b)$$

Das Problem zur numerischen Berechnung der dynamischen Suszeptibilität reduziert sich damit auf die Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten μ_{ij} für $0 \leq i, j \leq M - 1$, die gemäß Gleichung (5.6) durch die Spur einer $d \times d$ -Matrix gegeben sind, wenn mit d die Dimension des Hilbertraums bezeichnet wird. Da diese im Allgemeinen mit der Systemgröße L exponentiell anwächst, z. B. $d = 2^L$ für die Spin-1/2-XXZ-Kette, muss weiter vereinfacht werden. Anstatt über eine vollständige Basis des Hilbertraums zu summieren, wird zur Berechnung der Spur nur eine kleine Anzahl $R \ll d$ an zufällig ausgewählten Zuständen herangezogen,

$$\mu_{ij} = \text{Sp} \left\{ S^+ T_i(\tilde{H}) S^- T_j(\tilde{H}) \right\} \approx \frac{1}{R} \sum_{r=0}^{R-1} \langle r | S^+ T_i(\tilde{H}) S^- T_j(\tilde{H}) | r \rangle. \quad (5.8)$$

Die Wirkung von $T_j(\tilde{H})$ auf einen Zustand $|r\rangle$ kann wegen der definierenden Rekursionsrelation der Chebyshev-Polynome schnell berechnet werden. In den Berechnungen dieser Arbeit wurden stets Werte von R zwischen 40 und 100 benutzt. Die Genauigkeit der Näherung (5.8) ist davon weitestgehend unabhängig, denn der relative Fehler kann durch $\mathcal{O}(1/\sqrt{Rd})$ abgeschätzt werden und ist wegen $d \gg 1$ sehr klein [111]. Da alle Summanden noch mit den entsprechenden Boltzmann-Faktoren multipliziert werden, ist dieses Verfahren besonders gut für hohe Temperaturen geeignet, weil in diesem Fall alle Zustände in (5.1) gleich gewichtet werden. Beispiele hierzu werden im nächsten Abschnitt gezeigt.

Für sehr tiefe Temperaturen hingegeben werden die energetisch tief liegenden Zustände durch die Boltzmann-Faktoren viel stärker gewichtet als alle anderen. Wenn diese aber in der zufälligen Auswahl der Zustände nicht vorkommen, führt dies zu ungenauen Resultaten. Deswegen werden in den numerischen Rechnungen zusätzlich zu den R Zufallsvektoren noch die Zustände des Niedrigenergiesektors explizit berücksichtigt, die mit Hilfe einer Lancos-Rekursion exakt bestimmt werden [59]. Für die Daten der XXZ-Kette in Abbildung 4.1 wurden beispielsweise pro

S^z - und Impulssektor zwei Zustände vom Rest des Spektrums separiert (siehe unten). Die explizite Berücksichtigung weniger, spezieller Zustände erhöht die Rechenzeit des gesamten Verfahrens kaum.

Für die endliche XXZ-Kette mit periodischen Randbedingungen im longitudinalen Magnetfeld ergeben sich einige Besonderheiten. Da der Hamiltonoperator H , der Translationsoperator und die z -Komponente des Gesamtspins paarweise kommutieren, zerfällt der Hilbertraum in Sektoren, die durch die entsprechenden Quantenzahlen E , p und m_z charakterisiert sind. Damit der zeitaufwendigste Teil der numerischen Berechnung, nämlich die Berechnung aller Entwicklungskoeffizienten μ_{ij} für $0 \leq i, j \leq M - 1$ gemäß Gleichung (5.8), vom Magnetfeld unabhängig ist, wird \tilde{H} mit dem Hamiltonoperator der XXZ-Kette ohne äußeres Magnetfeld gebildet. Die Entwicklungskoeffizienten werden dann für die unterschiedlichen Sektoren des Hilbertraums mit R Zufallsvektoren pro Sektor separat berechnet, d. h. sie hängen von den jeweiligen Werten von m_z und p ab. Wird für die Koeffizienten eines Sektors mit Spinquantenzahl m_z in Gleichung (5.2a) der Boltzmann-Faktor $e^{-(y-hm_z)/T}$ statt $e^{-y/T}$ benutzt, so ist die Magnetfeldabhängigkeit in der dynamischen Suszeptibilität korrekt berücksichtigt.

Wenn also für gegebene Systemgröße L und Anisotropie δ der XXZ-Kette (3.5) die Entwicklungskoeffizienten μ_{ij} mit Gleichung (5.8) für festes M und R einmal berechnet worden sind, kann mit den Gleichungen (5.7) und (5.2) für jede Temperatur mittels numerischer Integration eine Approximation der Funktion $\chi''_{+-}(\omega, h)$ bestimmt werden. Ein großer Vorteil dieser Methode besteht also darin, dass für unterschiedliche Werte von T , ω und h keine neue Chebyshev-Entwicklung benötigt wird, was der aufwendigste Teil des gesamten Verfahrens ist. Auch lassen sich die Momente in ω - und h -Richtung aus dem gleichen numerischen Datensatz für $\chi''_{+-}(\omega, h)$ bestimmen (siehe z. B. Abbildung 4.3).

Eine weitere Eigenschaft, die diese Methode auszeichnet, betrifft die numerische Berechnung der Momente $m_n(T, h)$ und $M_n(T, \omega)$ von χ''_{+-} aus den Gleichungen (4.3) und (4.13). Da die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten μ_{ij} auf einer Mittelung über zufällig ausgewählte Zustände basiert, sind diese mit einem numerischen Fehler behaftet, der sich auf die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} überträgt. Obwohl der numerische Fehler von χ''_{+-} selbst kaum wahrnehmbar ist, wird dieser natürlich verstärkt, wenn $\chi''_{+-}(\omega, h)$ mit Potenzen von $(\omega - h)$ multipliziert wird. Große Werte von $(\omega - h)$ verursachen somit einen spürbaren Fehler in den Momenten $m_{n \geq 1}(T, h)$ oder $M_{n \geq 1}(T, \omega)$ (siehe rechtes Diagramm von Abbildung 5.1). Dieses Problem kann umgangen werden, indem die Multiplikation mit $(\omega - h)$ nicht im Frequenzraum, sondern im Raum der Chebyshev-Entwicklungskoeffizienten durchgeführt wird. Um dies zu verstehen, wird eine eindimensionale Funktion $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ betrachtet, deren Chebyshev-Entwicklungskoeffizienten durch $\mu_i = \int_{-1}^1 f(x) T_i(x) dx$ gegeben seien. Die Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\mu}_i$ von $xf(x)$ lauten wegen $x = T_1(x)$ und der Relation (5.4) für die Chebyshev-Polynome mit $k = 1$

$$\tilde{\mu}_i = \int_{-1}^1 f(x) T_1(x) T_i(x) dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(x) (T_{i+1}(x) + T_{i-1}(x)) dx = \frac{1}{2} (\mu_{i+1} + \mu_{i-1}). \quad (5.9)$$

Demnach bedeutet eine Multiplikation der zu entwickelnden Funktion mit der unabhängigen Variablen eine Mittelung im Raum der Entwicklungskoeffizienten. Die Anwendung hiervon auf die Entwicklung (5.7a) der Funktion $(\omega - h)^n \chi''_{+-}(\omega, h)$ führt dazu, dass sich ein unsystematischer Fehler in den numerischen Daten wegmittelt und die Momente $m_n(T, h)$ und $M_n(T, \omega)$ sowie die Resonanzverschiebung und die Linienbreite besser abgeschätzt werden können. Diese Eigenschaft ist deutlich im rechten Diagramm der Abbildung 5.1 des nächsten Abschnitts zu beobachten. Au-

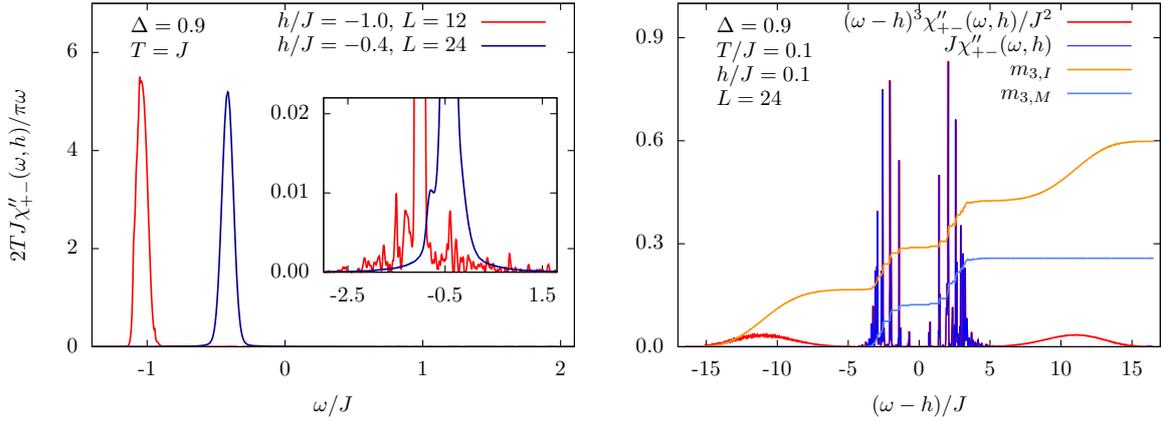


Abb. 5.1: Links: Vergleich der mit $2T/\pi\omega$ skalierten Funktion $J\chi''_{+-}(\omega, h)$ in Abhängigkeit der Frequenz bei fester Temperatur $T = J$ und Anisotropie $\Delta = 0.9$ für verschiedene Kettenlängen $L = 12$ ($h = -J$) und $L = 24$ ($h = -0.4J$).

Rechts: Vergleich des dritten Moments m_3 , einerseits berechnet über Integration von $(\omega - h)^3 \chi''_{+-}(\omega, h)$ und andererseits über eine Mittelung im Raum der Entwicklungskoeffizienten gemäß Gleichung (5.9), bezeichnet mit $m_{3,I}$ und $m_{3,M}$.

ßerdem erklärt dies auch, warum in Abbildung 4.1 die numerischen Daten für die Linienbreite $\Delta\omega$ näher an den exakten Kurven liegen als die Daten für die Resonanzverschiebung $\delta\omega$.

5.2 Numerische Beispielrechnungen

In diesem Abschnitt wird die numerische Methode anhand einiger Beispiele untersucht.

Im linken Diagramm der Abbildung 5.1 ist die mit $2T/\pi\omega$ skalierte dynamische Suszeptibilität $J\chi''_{+-}(\omega, h)$ als Funktion der Frequenz ω für zwei verschiedene Kettenlängen ($L = 12$ und 24) dargestellt. Für unendlich hohe Temperatur hängt die skalierte Funktion nur von der Differenz $\omega - h$ ab. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ sollten demnach die beiden Peaks bei $\omega = -J$ und $\omega = -0.4J$ nach einer entsprechenden Verschiebung von $0.6J$ zur Deckung kommen. Für die Kurven mit endlichem L scheint dies für den Hauptpeak näherungsweise zu gelten. Eine extreme Vergrößerung zeigt jedoch, dass die Kurve für $L = 12$ viel stärker verrauscht ist als die für $L = 24$. Letztere ist viel glatter, und die *Finite-Size*-Korrekturen sind deutlich kleiner. Es stellt sich heraus, dass 24 Gitterplätze in der Regel ausreichen, um die numerischen Daten mit analytischen Resultaten gut vergleichen zu können.

Für tiefe Temperaturen kann im rechten Diagramm der Abbildung beobachtet werden, dass das Spektrum für endliche Kettenlängen diskret ist. Die deutlich erkennbare Viel-Peak-Struktur rührt daher, dass die Boltzmannfaktoren viele mögliche Energieübergänge exponentiell unterdrücken, und nur die Frequenzen, die den bevorzugten Übergangsenergien entsprechen, zur dynamischen Suszeptibilität beitragen. Um eine Vorstellung von der Linienform im thermodynamischen Limes zu bekommen, müssen im Fall tiefer Temperaturen die numerischen Rechnungen für Ketten mit mehr als 24 Gitterplätzen durchgeführt werden. Eine detailliertere Analyse der Abhängigkeit der Viel-Peak-Struktur von der Kettenlänge ist in Abschnitt 7.6 zu finden. Falls allerdings nur über die Spektralfunktion integrierte Größen von Interesse sind, reichen wiederum kleinere Kettenlängen

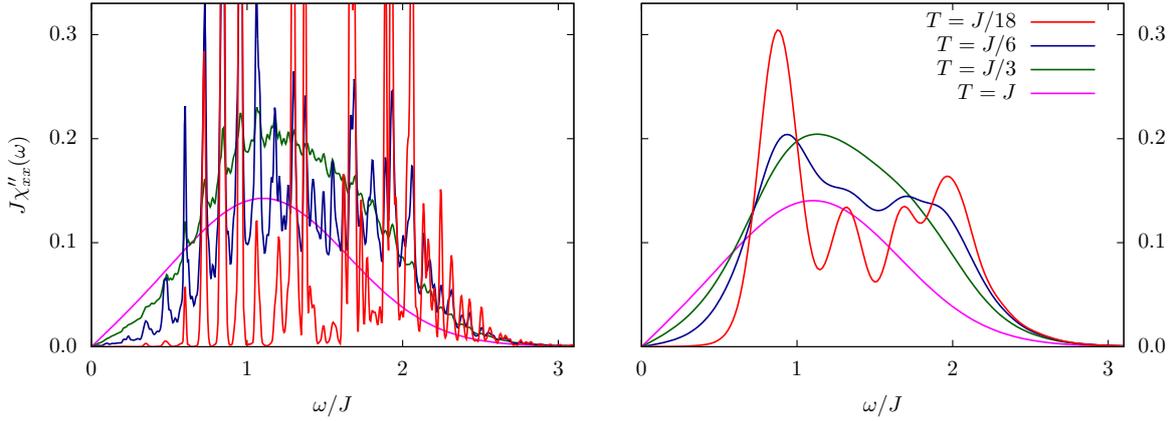


Abb. 5.2: Dynamische Suszeptibilität $J\chi''_{xx}(\omega)$ der XX-Kette als Funktion der Frequenz für $h = 0.4J$ und verschiedene Temperaturen. Die numerischen Rechnungen wurden für eine Kette der Länge $L = 24$ und eine Auflösung $M = 1024$ durchgeführt. Im rechten Diagramm sind diese numerischen Daten mit dem `sbezier`-Algorithmus des Graphikprogramms Gnuplot [112] geglättet worden.

aus. Zur Erhöhung der numerischen Genauigkeit hilft dabei die im vorherigen Abschnitt beschriebene Methode der Mittelung im Raum der Chebychev-Entwicklungskoeffizienten aus Gleichung (5.9) enorm. Dies wird z. B. durch einen Vergleich des dritten Moments im rechten Diagramm der Abbildung 5.1 belegt.

In Abbildung 5.2 werden die Ergebnisse numerischer Berechnungen der dynamischen Suszeptibilität $\chi''_{xx} = (\chi''_{+-} + \chi''_{-+})/4$ für das eindimensionale Spin-1/2-XY-Modell bei festem Magnetfeld $h = 0.4J$ für verschiedene mittlere und kleine Temperaturen miteinander verglichen. Das linke Diagramm zeigt, dass der Kurvenverlauf für kleiner werdende Temperatur immer unruhiger wird. In [67] wird diese dynamische Suszeptibilität unter Ausnutzung der Symmetrie des XY-Modells für eine Systemgröße von 400 Gitterplätzen berechnet. Mit den numerischen Methoden der vorliegenden Arbeit konnten die Kurven aus [67] allerdings nur ansatzweise reproduziert werden, wobei der wesentliche Unterschied in der viel kleineren Zahl der Gitterplätze liegt (hier nur $L = 24$). Die rote Kurve im rechten Diagramm der Abbildung 5.2 besitzt eine extrem unruhige Struktur und stimmt selbst nach einer Glättung nur ungefähr mit derjenigen aus Abbildung 5 der Arbeit [67] überein.

Die absorbierte Intensität der XX-Kette im thermodynamischen Limes weist ein interessantes Verhalten auf, wie die geglättete rote Kurve aus Abbildung 5.2 erahnen lässt. Sie besitzt zwei lokale Maxima, wobei das eine etwa bei $\omega = 0.9J$ und das andere bei $\omega = 2J$ liegt, und gehört somit zu einer nichttrivialen bimodalen Verteilung.

In Abbildung 5.3 werden verschiedene numerisch berechnete Linienbreiten der mit $2T/\pi\omega$ skalierten dynamischen Suszeptibilität sowohl in ω - als auch in h -Richtung miteinander verglichen. Im linken Diagramm ist diese Funktion für den Anisotropieparameter $\delta = -0.1$ bei hoher Temperatur ($T = 100J$) dargestellt und die unterschiedlichen Breiten, die sich aus einer Extrapolation der Kurven des rechten Diagramms ergeben, sind als horizontale Linien eingezeichnet. In diesem speziellen, aber eventuell für reale Materialien relevanten Bereich des Anisotropiepa-

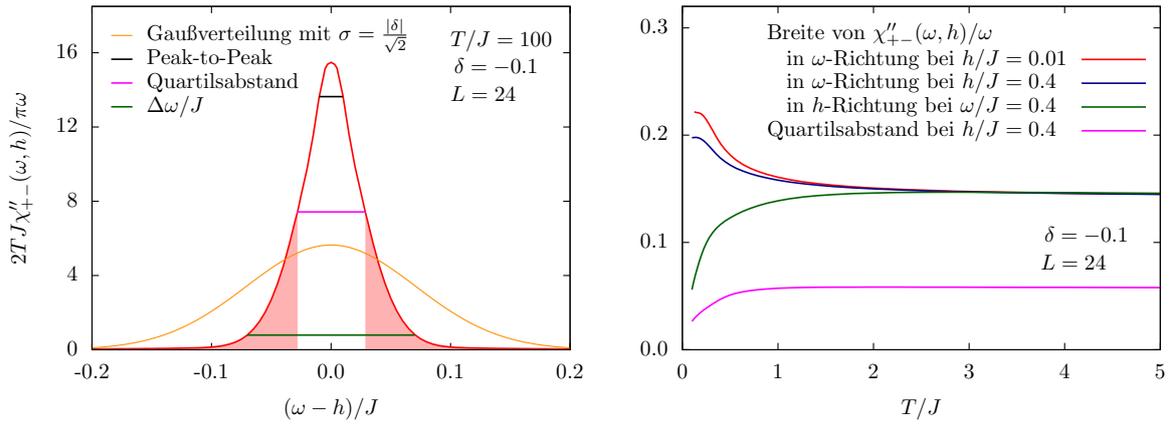


Abb. 5.3: Vergleich der verschiedenen Maße für die Linienbreite $\Delta\omega$, Δh , Quartilsabstand und *Peak-to-Peak*-Breite der Funktion $\chi''_{+-}(\omega, h)/\omega$ für große Temperaturen (horizontale Linien links), sowie als Funktion der Temperatur (rechts). Im linken Diagramm ist zusätzlich eine Gaußverteilung mit Standardabweichung $\sigma = |\delta|/\sqrt{2}$ eingezeichnet.

rameters sind die Unterschiede in den verschiedenen Definitionen der Linienbreite aus Abschnitt 2.3.4 besonders gut zu erkennen. Die *Peak-to-Peak*-Breite ist deutlich kleiner als die Breite $2\Delta\omega$, die über die mittlere quadratische Abweichung definiert ist. Der Wert des Quartilsabstands liegt dazwischen. Zur Veranschaulichung der Breite $2\Delta\omega$ ist eine Gaußfunktion mit Standardabweichung $\sigma = |\delta|/\sqrt{2}$ eingezeichnet. Dieser Wert entspricht dem Hochtemperaturgrenzfall von $\Delta\omega$ der Funktion $\chi''_{+-}(\omega, h)/\omega$. Es sei darauf hingewiesen, dass bei einem Vergleich von $\Delta\omega$ mit der *Peak-to-Peak*-Breite oder dem Quartilsabstand ein Faktor 2 berücksichtigt werden muss.

6 Linienformen für hohe Temperaturen

In diesem Kapitel wird die Resonanzkurve der XXZ-Kette im Grenzfall hoher Temperaturen untersucht und eine Funktion angegeben, die deren Form in diesem Grenzfall näherungsweise beschreibt.

In Anhang B.5 wird gezeigt, dass die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} im Limes $T \rightarrow \infty$ identisch verschwindet. Es wird die mit $2T/\pi\omega$ skalierte Funktion ϕ der dynamischen Suszeptibilität definiert, die als normierte und symmetrische Verteilung interpretiert werden kann. Für die XXZ-Kette gilt

$$\phi(\omega - h) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{\omega\pi} \chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{\pi LZ'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-h)t} \text{Sp} \left\{ (e^{it \text{ad}_H} S^+) S^- \right\} dt \quad (6.1)$$

mit $H = H_{XXZ}$ aus (3.4) und $Z' = \text{Sp}\{\mathbb{1}\} = 2^L$.

Die dynamische Korrelationsfunktion $\text{Sp}\{(e^{it \text{ad}_H} S^+) S^-\}/LZ'$ wird in Anhang C von [21] in eine Taylorreihe bis zur achten Ordnung um $t = 0$ entwickelt. Mit Hilfe geeigneter Umsortierungen der Terme wird innerhalb dieser Reihe eine Systematik für kleine und große Werte von $\Delta = 1 + \delta$ erkennbar. Diese Systematik wurde unter Zuhilfenahme des Computer-Algebra-Programms FORM [108] bis zur Ordnung 38 überprüft und bestätigt. Werden die Reihen in beiden Grenzfällen fortgesetzt, ergibt sich nach Fouriertransformation gemäß Gleichung (6.1) zum einen für $\delta \rightarrow \infty$ der Ising-Grenzfall (A.27) und zum anderen für $\delta = -1$ das exakte Ergebnis (6.2). Im zweiten Fall summieren sich nämlich alle Terme zur Gaußfunktion $\frac{1}{2}e^{-t^2/4}$ auf. Am isotropen Punkt $\delta = 0$ verschwinden alle Terme dieser Taylorreihe bis auf den konstanten Term, sodass $\phi(\omega - h) = \delta(\omega - h)$ gilt.

6.1 Eindimensionales Spin-1/2-XX-Modell

Obwohl die Funktion ϕ aus Definition (6.1) in einem gewissen Sinne einfacher als die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} ist, kann sie im generischen Fall der XXZ-Kette $-1 \leq \delta \neq 0$ ebenso wenig exakt berechnet werden wie χ''_{+-} selbst. Eine Ausnahme hierbei bildet der Punkt $\delta = -1$, an dem sich die XXZ-Kette wegen $\Delta = 0$ auf die sogenannte XX-Kette reduziert. Mit Hilfe einer Jordan-Wigner-Transformation [45] lässt sich diese Spinkette auf ein Modell freier Fermionen abbilden, weshalb $\delta = -1$ auch „Punkt freier Fermionen“ genannt wird. In der Arbeit [19] von Brandt und Jacoby wird gezeigt, dass die Funktion ϕ an diesem Punkt durch eine Gaußverteilung gegeben ist,

$$\phi(\omega) = \frac{1}{J\sqrt{\pi}} e^{-(\omega/J)^2} \longleftrightarrow \text{Sp} \left\{ (e^{it \text{ad}_H} S^+) S^- \right\} = \frac{1}{2} e^{-t^2/4}. \quad (6.2)$$

Für endliche Temperatur $T < \infty$ beschreibt die Funktion $\text{Sp} \left\{ (e^{it \text{ad}_H} S^+) S^- \right\}$ komplizierte Vielteilchenkorrelationen zwischen den Jordan-Wigner-Fermionen [30]. Die zu ϕ gehörige normierte absorbierte Intensität lautet

$$I_{XX}(\omega, h) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{8T}{\sqrt{\pi}(J^2 + 2h^2)} I(\omega, h) = \frac{2\sqrt{\pi}\omega^2 \phi(\omega - h)}{J^2 + 2h^2} = \frac{2\omega^2 e^{-(\frac{\omega-h}{J})^2}}{J(J^2 + 2h^2)} \quad (6.3)$$

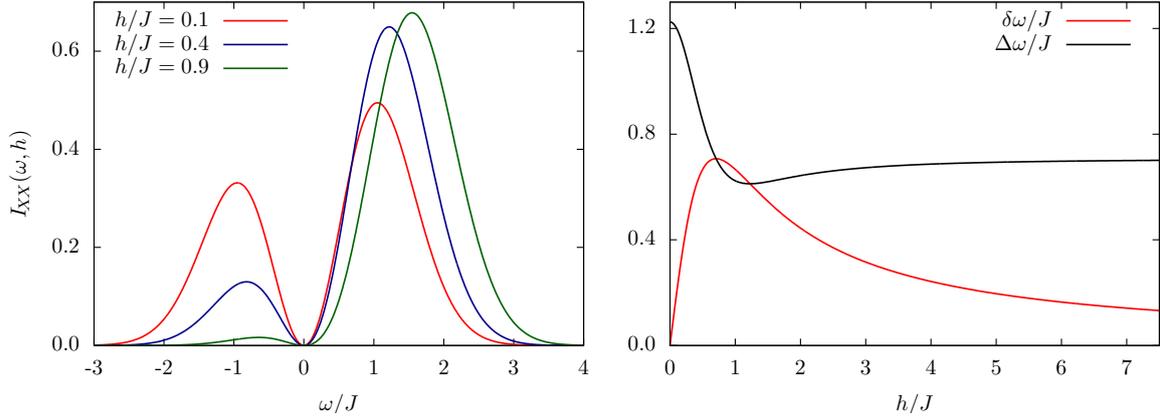


Abb. 6.1: Normierte absorbierte Intensität $I_{XX}(\omega, h)$ der XX-Kette als Funktion der Frequenz für verschiedene Magnetfelder h/J (links) und zugehörige Resonanzverschiebung $\delta\omega$ und Linienbreite $\Delta\omega$ aus Gleichung (6.4) als Funktion des Magnetfeldes für unendlich hohe Temperatur (rechts).

und ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Die Linienbreiten von $I_{XX}(\omega, h)$ in ω - und h -Richtung ergeben sich hiermit zu

$$\frac{\Delta\omega}{J} = \frac{\sqrt{3/2 + 2(h/J)^4}}{1 + 2(h/J)^2}, \quad \frac{\Delta h}{J} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (6.4)$$

Das zweite Ergebnis stimmt mit dem Hochtemperatur-Grenzfall (4.22c) der Linienbreite in h -Richtung überein. Dieses Beispiel zeigt deutlich, dass sich die absorbierte Intensität in ω -Richtung von der in h -Richtung unterscheidet, weil die beiden Linienbreiten $\Delta\omega$ und Δh voneinander verschieden sind.

In Abbildung 6.1 sind die Resonanzverschiebung $\delta\omega/J = 2Jh/(J^2 + 2h^2)$ und die Linienbreite $\Delta\omega/J$ aus Gleichungen (6.2) als Funktion des Magnetfeldes dargestellt. Die Kurven wurden außerdem mit Hilfe der Gleichungen (4.5) und (4.12) durch Lösen der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen aus Abschnitt 3.2.3 für $\Delta \rightarrow 0$ und $T \rightarrow \infty$ numerisch berechnet. Für $\Delta = 10^{-n}$ und $T/J = 10^n$ mit $n = 6, 7, 8$ beträgt die relative Abweichung von den exakten Ergebnissen 10^{-n} , was der Ordnung von Δ und J/T entspricht. Das bedeutet, dass der numerische Fehler der Lösungen der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen in diesem Fall nicht größer als 10^{-8} ist. Die auf diese Weise berechneten Kurven sind also mit denen aus Abbildung 6.1 nahezu deckungsgleich, weshalb sie hier nicht dargestellt werden.

6.2 Normal-inverse Gaußverteilung als Modell für die Linienform der XXZ-Kette

In Anhang B.5 und im vorherigen Abschnitt wird gezeigt, dass die Funktion ϕ als normierte Verteilung nur von der Differenz $\omega - h$ abhängt und sowohl am Punkt freier Fermionen als auch am isotropen Punkt unimodal und symmetrisch ist. Die numerischen Daten aus Abbildung 6.2 deuten darauf hin, dass dies auch für alle Werte von δ zwischen -1 und 0 und sogar für kleine positive Werte von δ zutrifft. Dass die Funktion $\phi(\omega)$ für große Werte von ω wie $e^{-\omega^2/J^2}$ abfällt,

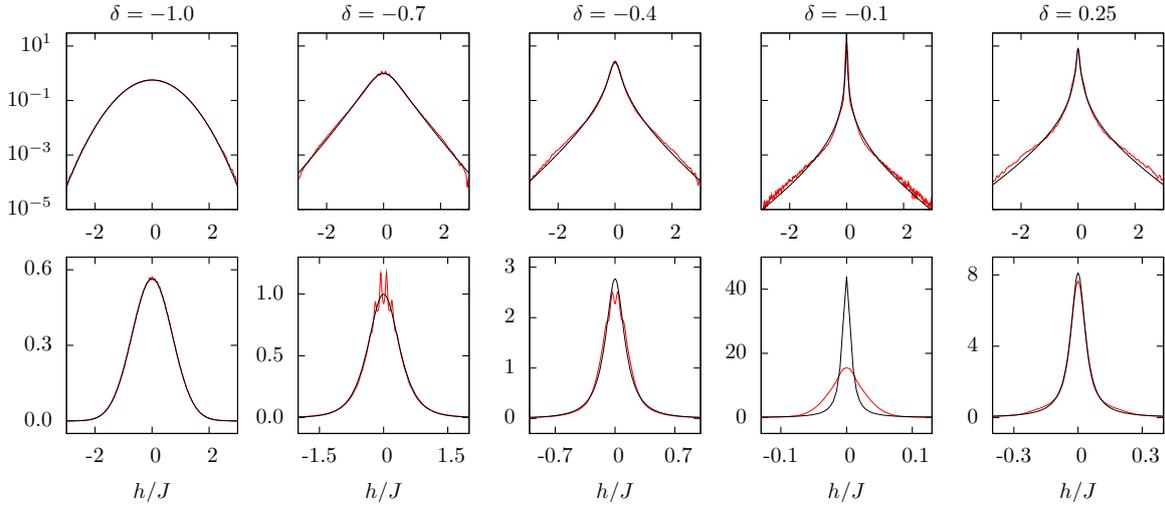


Abb. 6.2: Normal-inverse Gaußverteilungen (schwarze Linien) als Modell für die Linienform im Hochtemperaturbereich, verglichen mit numerischen Daten (rote Linien). Die Parameter der NIG wurden aus Gleichung (6.9) ermittelt, und die numerischen Kurven für $T/J = 100$, $\omega/J = 0.4$, $L = 16$ und $M = 1024$ berechnet, wobei für $\delta = -0.1$ die Kettenlänge auf $L = 20$ und die Auflösung auf $M = 4096$ erhöht wurden. Alle Diagramme zeigen die um $\omega/J = 0.4$ verschobene Verteilung $J\phi(\omega - h)$ als Funktion des Magnetfeldes (logarithmische Skala oben, lineare Skala und unterschiedliche Magnetfeldbereiche unten).

scheint nur speziell für den Punkt freier Fermionen zu gelten. Bei allen anderen Werten deuten die logarithmischen Darstellungen aus Abbildung 6.2 darauf hin, dass ϕ exponentiell abfällt.

Eine Familie von unimodalen, symmetrischen und exponentiell abfallenden Verteilungen, die sowohl die Gaußverteilung (Punkt freier Fermionen) als auch die δ -Funktion (isotroper Punkt) als Grenzfälle enthält, stellt die zweiparametrische Familie der normal-inversen Gaußverteilungen dar,

$$\mathcal{N}(x|\alpha, \beta) = \frac{\alpha\beta e^{\alpha\beta} K_1(\alpha\sqrt{x^2 + \beta^2})}{\pi\sqrt{x^2 + \beta^2}}, \quad \alpha, \beta > 0, \quad (6.5)$$

wobei K_1 eine modifizierte Besselfunktion dritter Ordnung zum Index 1 ist [5]. Im Limes $\alpha \rightarrow \infty$ wird \mathcal{N} zu einer Gaußfunktion und für $\beta \rightarrow 0$ zu einer δ -Funktion. Die Momente der normal-inversen Gaußverteilung (NIG) können mit Hilfe ihrer charakteristischen Funktion [6]

$$\tilde{\mathcal{N}}(k|\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\alpha, \beta) e^{ikx} dx = e^{\beta(\alpha - \sqrt{k^2 + \alpha^2})} \quad (6.6)$$

leicht berechnet werden. Es gilt

$$\langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{\beta}{\alpha}, \quad \langle x^4 \rangle_{\mathcal{N}} = 3 \left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} + \frac{\beta}{\alpha^3} \right), \quad (6.7)$$

Diese werden mit den in Anhang B.5 berechneten dimensionslosen Momenten (B.51) der Verteilungsfunktion ϕ verglichen, um die NIGs an ϕ anzupassen. Werden beispielsweise das zweite und

das vierte Moment miteinander identifiziert,

$$\langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}} = \langle x^2 \rangle_{\phi} = \frac{\delta^2}{2}, \quad \langle x^4 \rangle_{\mathcal{N}} = \langle x^4 \rangle_{\phi} = \frac{\delta^2}{2} \left(\frac{3}{2} + \delta + \delta^2 \right), \quad (6.8)$$

folgt für die beiden Parameter α und β der NIG

$$\alpha = \sqrt{\frac{6}{(1+\delta)(3-\delta)}}, \quad \beta = \frac{\delta^2}{2} \sqrt{\frac{6}{(1+\delta)(3-\delta)}}. \quad (6.9)$$

Damit stimmen sowohl die Breite $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ als auch die Wölbung

$$w = \frac{\langle x^4 \rangle}{\langle x^2 \rangle^2} - 3 = \frac{(3-\delta)(1+\delta)}{\delta^2} \geq 0 \quad \text{für} \quad -1 \leq \delta \leq 3 \quad (6.10)$$

für beide Funktionen \mathcal{N} und ϕ überein. Positive bzw. negative Werte von w bedeuten, dass die Verteilungsfunktion spitzer bzw. stumpfer als eine Gaußfunktion ist [38]. In Anhang A.3 wird der Ising-Limes $\delta \rightarrow \infty$ ausführlich untersucht und festgestellt, dass schon ab $\delta = 1$ eine Drei-Peak-Struktur von ϕ zu erkennen und damit ein Vergleich mit der NIG nicht mehr sinnvoll ist. Deswegen wird hier nur der Bereich $-1 \leq \delta \leq 1/4$ betrachtet, in dem ϕ unimodal ist. In diesem Bereich ist übrigens wegen der Ungleichung (6.10) der Peak von ϕ nicht stumpfer und in der Nähe des isotropen Punktes sogar deutlich spitzer als eine Gaußkurve (siehe Abbildung (5.3)). Für $\delta = -1$ bzw. $\delta \rightarrow 0$ folgt $w = 0$ bzw. $w \rightarrow \infty$, wie es für eine Gaußverteilung und einen unendlich spitzen δ -Peak zu erwarten ist. Für $\delta = -1$ und $\delta = 0$ liefert die NIG mit den Parametern α und β aus Gleichungen (6.9) ein exaktes Modell für die Funktion ϕ . Dies ist für $-1 < \delta \neq 0$ nicht mehr der Fall, was durch einen Vergleich des sechsten Moments von \mathcal{N} ,

$$\langle x^6 \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{\delta^2}{2} \left(\frac{45}{4} + 15\delta + \frac{35}{4}\delta^2 + \frac{5}{2}\delta^3 + \frac{5}{4}\delta^4 \right), \quad (6.11)$$

mit dem von ϕ aus Gleichung (B.51c) gefolgert werden kann.

In Abbildung 6.2 werden die NIGs, deren Parameter mit Hilfe der Gleichungen (6.9) für den jeweiligen Wert von δ berechnet wurden, mit den entsprechenden numerisch berechneten Kurven verglichen. Es ist bemerkenswert, wie gut die Linienformen der NIGs mit den numerischen Daten übereinstimmen. Es sei darauf hingewiesen, dass die NIGs nicht an die numerischen Daten angepasst, sondern dass die Parameter α und β über die Relationen (6.9) berechnet wurden. Die gute Übereinstimmung, insbesondere die des exponentiellen Zerfalls, kommt dabei automatisch zustande. Die Abweichung für $\delta = -0.1$ in dem Diagramm mit linearer Skala aus Abbildung 6.2 scheint nicht aus einer zu geringen Auflösung der numerischen Berechnung zu resultieren, sondern vielmehr daraus, dass die NIG für kleine Werte des Anisotropieparameters δ keine gute Approximation mehr darstellt. Für $\delta = 0$ hingegen ist die Übereinstimmung wieder exakt, allerdings wegen der δ -Funktion weder numerisch zugänglich noch bildlich darstellbar.

Werden die Parameter α und β der NIG gemäß Gleichungen (6.9) festgelegt, so folgt für ihre über die mittlere quadratische Abweichung (2.43) definierte Linienbreite $\Delta_{\text{msd}} x = \sqrt{\langle x^2 \rangle_{\mathcal{N}}} \sim |\delta|$. Andererseits kann die *Peak-to-Peak*-Breite (2.41b) aus Abschnitt 2.3.4 näherungsweise bestimmt werden. Wegen der Symmetrie der NIG reicht die Kenntnis des positiven Wendepunktes x_r aus den Gleichungen (2.41). Unter Benutzung der definierenden Differentialgleichung von K_1 ,

$$y^2 K_1''(y) = (y^2 + 1)K_1(y) - yK_1'(y), \quad y = \alpha\sqrt{x^2 + \beta^2}, \quad (6.12)$$

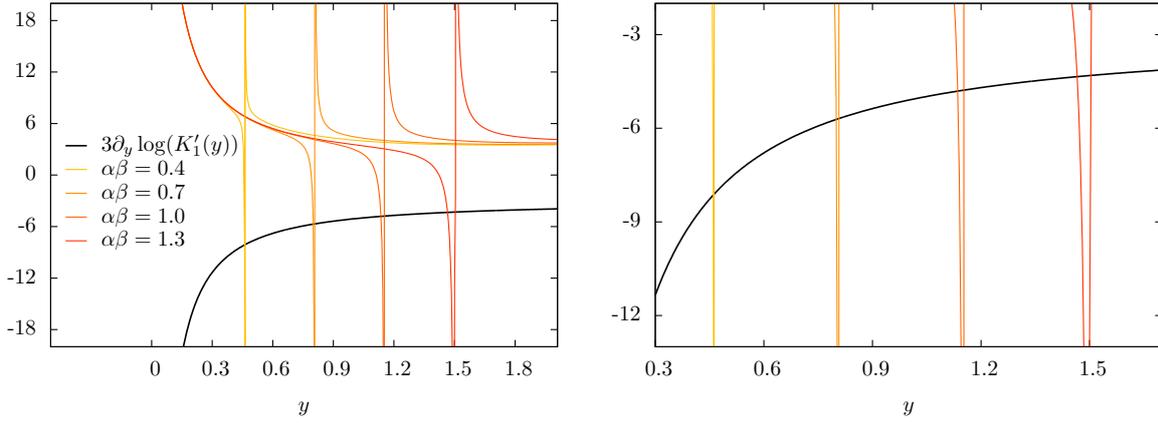


Abb. 6.3: Logarithmische Ableitung der modifizierten Besselfunktion $K_1(y)$, rechte Seite der Gleichung (6.13), verglichen mit der linken Seite von (6.13) für verschiedene Werte von $\alpha\beta$.

sowie den Relationen $\partial_x y = \alpha^2 x/y$ und $\partial_x^2 y = \alpha^4 \beta^2 / y^3$ kann gezeigt werden, dass der positive Wendepunkt, definiert über $\partial_x^2 \mathcal{N}(x|\alpha, \beta)|_{x=x_r} = 0$, folgende Gleichung erfüllt,

$$\frac{3}{y} + y + \frac{y(\alpha\beta)^2}{3y^2 - (2\alpha\beta)^2} = 3 \partial_y \ln(K_1(y)) \quad \text{mit} \quad y = \alpha \sqrt{x_r^2 + \beta^2} \geq 0. \quad (6.13)$$

Diese algebraische Gleichung kann prinzipiell numerisch gelöst werden. Für eine grobe Abschätzung der *Peak-to-Peak*-Breite reicht aber folgendes Argument. Da $\partial_y \ln(K_1(y)) < -1$ für alle $y \geq 0$ gilt, und die linke Seite der Gleichung große positive Werte für $y \rightarrow 0$ und $y \rightarrow \infty$ annimmt, liegt die gesuchte Lösung in der Nähe der Polstelle (siehe Abbildung 6.3). Damit folgt

$$y \lesssim \frac{2\alpha\beta}{\sqrt{3}} \quad \Rightarrow \quad x_r \lesssim \frac{\beta}{\sqrt{3}} \quad \Rightarrow \quad \Delta_{\text{ptp}}x = 2x_r \lesssim \delta^2 \sqrt{\frac{2}{(1+\delta)(3-\delta)}}. \quad (6.14)$$

Die NIG liefert somit ein Beispiel für eine Verteilung, deren beide Breiten $\Delta_{\text{msd}}x \sim |\delta|$ und $\Delta_{\text{ptp}}x \sim \delta^2$ insbesondere für kleine Parameter δ sehr unterschiedliche Werte annehmen können. Das Verhalten der *Peak-to-Peak*-Breite ist konform mit dem Ergebnis (2.48) von Oshikawa und Affleck [89].

Wenn also experimentelle Daten bei hohen Temperaturen durch eine NIG gut approximiert werden können, ermöglicht dies die Bestimmung des Anisotropieparameters δ . Dieser kann sogar berechnet werden, ohne den Wert des Austauschintegrals J zu kennen, und zwar über das Verhältnis der beiden Linienbreiten,

$$\frac{\Delta_{\text{ptp}}x}{\Delta_{\text{msd}}x} \approx \frac{2|\delta|}{\sqrt{(1+\delta)(3-\delta)}}. \quad (6.15)$$

Wird die *Peak-to-Peak*-Breite aus Abbildung 6 der Arbeit [107] von Vasil'ev et al. abgeschätzt zu $\Delta_{\text{ptp}}h = J\Delta_{\text{ptp}}x \approx 2 \text{ kOe} \hat{=} 0.27 \text{ K}$, so kann Gleichung (6.14) mit $J = 22 \text{ K}$ numerisch gelöst werden. Für die Anisotropie ergibt sich damit $\delta \approx -0.12$. Dieser Wert entspricht ungefähr der Vorhersage von Maeda et al., die in ihrer Arbeit [69] durch einen Fit der Resonanzverschiebung,

basierend auf den Daten aus [107], einen Wert von $\delta = -0.15$ erhalten. Die Autoren der Arbeit [57] erhalten für das gleiche Material wie in [107] (LiCuVO_4) für das Austauschintegral einen Wert von $J = 30 \text{ K}$. Aus Abbildung 4 dieser Arbeit kann der Wert $\Delta_{\text{ptp}}h = 1.5 \text{ kOe}$ abgelesen werden. Damit folgt zusammen mit Gleichung (6.14) für den Anisotropieparameter $\delta \approx -0.088$, was zur Vorhersage von $J_{zz}/J \approx -2 \text{ K}/30 \text{ K} \approx -0.067$ aus [57] passt.

7 Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität

In diesem Kapitel wird die XXZ-Kette im feldfreien Fall für verschwindende Temperatur betrachtet, der Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität exakt berechnet und dieser in verschiedenen Grenzfällen der XXZ-Kette (3.4) analysiert. Die Untersuchungen beschränken sich dabei auf den massiven Bereich $\Delta = 1 + \delta > 1$, in dem der Grundzustand der XXZ-Kette zweifach entartet ist.

Spektraldarstellungen wie (2.31) und (2.32) dienen als Ausgangspunkt für die approximative Bestimmung von dynamischen Korrelationsfunktionen, die dabei als Summe von sogenannten Formfaktoren dargestellt werden. Für den Fall $T \rightarrow 0$ sind letztere durch die Matrixelemente zwischen dem Grundzustand und den angeregten Zuständen definiert. Im Falle einer Entartung des Grundzustands muss über die möglichen Grundzustände gemittelt werden. Die Näherung besteht nun darin, dass die Summe, wie sie z. B. in Gleichung (2.32) vorkommt, durch eine Teilsumme ersetzt wird, in der alle Formfaktoren exakt bekannt sind. Solch ein Verfahren ist effizient, falls Unterklassen von Formfaktoren identifiziert werden können, die zur betrachteten Korrelationsfunktion maßgeblich beitragen.

Im kritischen Bereich $-1 < \Delta \leq 1$ der XXZ-Kette befindet sich der nichtentartete Grundzustand an einem kritischen Punkt, und die Korrelationsfunktionen der lokalen Operatoren fallen im thermodynamischen Limes algebraisch ab [3, 49, 51]. Das bedeutet, dass die Summation der Formfaktoren und der thermodynamische Limes nicht vertauscht werden dürfen. Für den dynamischen Strukturfaktor wurden einige Resultate durch Summation von Formfaktoren für endliche Kettenlängen erzielt [10, 11, 22, 93], was allerdings mit einem großen numerischen Aufwand verbunden ist. In jüngster Zeit konnte für die Zwei-Punkt-Funktionen eine exakte Summation der führenden Beiträge in der Asymptotik für große Abstände durchgeführt werden [50].

Im massiven Bereich $\Delta > 1$ ist die Situation mathematisch einfacher, denn es können bestimmte Klassen von Multi-Spinonen-Formfaktoren identifiziert werden, die im thermodynamischen Limes endlich bleiben [43]. Im Gegensatz zum kritischen Modell tragen demnach im thermodynamischen Limes nur endlich viele Summanden zur führenden Asymptotik der Zwei-Punkt-Funktionen bei. Beispielsweise zeigen die Berechnungen des dynamischen Strukturfaktors, dass die Zwei-Spinonen-Zustände für $T = h = 0$ den dominanten Beitrag liefern [18].

Um für $\Delta > 1$ den Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität zu ermitteln, werden die Resultate aus [17, 23, 43] benutzt. Es zeigt sich, dass die dynamische Suszeptibilität durch die Zwei-Spinonen-Zustände dominiert wird, solange Δ groß genug ist. Für $\Delta > 3/2$ macht der Zwei-Spinonen-Anteil $I^{(2)}(\omega)$ den überwiegenden Teil der gesamten absorbierten Intensität $I(\omega)$ aus, wohingegen er im isotropen Limes $\Delta \rightarrow 1$ marginal wird. Im Ising-Limes $\Delta \rightarrow \infty$ sind beide Intensitäten identisch, $I^{(2)}(\omega) = I(\omega)$, und das Resultat aus Anhang A.3 wird reproduziert.

Ein Vergleich mit numerischen Berechnungen der dynamischen Suszeptibilität für endliche Kettenlängen zeigt die hohe Güte der numerischen Methode aus Kapitel 5.

7.1 Zerlegung der dynamischen Suszeptibilität

Die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} aus Gleichung (2.27d) lautet für verschwindende Temperatur und ohne äußeres Magnetfeld

$$\chi''_{+-}(\omega, 0) = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_{T=0} dt. \quad (7.1)$$

Erwartungswerte für $T = 0$ sind gegeben durch

$$\langle \dots \rangle_{T=0} = \frac{1}{n_g} \sum_g \langle g | \dots | g \rangle, \quad (7.2)$$

wobei n_g den Entartungsgrad des Grundzustands bezeichnet und über alle Grundzustände $|g\rangle$ gemittelt wird. Wird der Kommutator aus Gleichung (7.1) explizit ausgeschrieben, so folgt wegen der Spinumkehr-Invarianz des Hamiltonoperators (3.4) der XXZ-Kette

$$\chi''_{+-}(\omega, 0) = \chi(\omega) - \chi(-\omega) \quad \text{mit} \quad \chi(\omega) = \frac{1}{2L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle S^+(t) S^- \rangle_{T=h=0} dt. \quad (7.3)$$

Die Spektraldarstellung von χ im Limes $T \rightarrow 0$ lautet analog zu Gleichung (2.32)

$$\chi(\omega) = \frac{\pi}{2L} \sum_{n,g} |\langle g | S^- | n \rangle|^2 \delta(\omega - E_n + E_g) \quad (7.4)$$

mit der Grundzustandsenergie $E_g < E_n$, wobei über die Grundzustände $|g\rangle$ und eine Basis $\{|n\rangle\}$ des Hilbertraums summiert wird. Anhand dieser Darstellung ist ersichtlich, dass wegen der δ -Funktionen $\chi(\omega) \geq 0$ für $\omega \geq 0$ und $\chi(\omega) = 0$ für $\omega < 0$ gilt. Die Funktion χ wird deswegen im weiteren Verlauf auch „positiver Teil der dynamischen Suszeptibilität“ genannt.

Werden die Multi-Spinonen-Zustände als Basis gewählt, tragen zur Summe in (7.4) alle Anregungen mit einer geraden Anzahl an Spinonen bei, während die Beiträge mit einer ungeraden Anzahl wegen der Auswahlregel verschwinden. Letztere wird nämlich durch die Matrixelemente $\langle g | S^- | n \rangle$ beschrieben, die nur dann ungleich Null sind, wenn der Zustand $|n\rangle$ den Gesamtspin $+1$ besitzt. Dies ist aber bei einem Zustand, der aus einer ungeraden Anzahl von Spin-1/2-Teilchen besteht, nicht möglich. Es gilt demnach

$$\chi(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \chi^{(2n)}(\omega), \quad (7.5)$$

wobei $\chi^{(2n)} \geq 0$ der „ $2n$ -Spinonen-Anteil“ der Funktion χ genannt wird. Es stellt sich heraus, dass der Zwei-Spinonen-Anteil $\chi^{(2)}$ für $\Delta \geq 3/2$ schon über 80% und für $\Delta > 2$ sogar über 96% der integrierten Intensität ausmacht (siehe Abschnitt 7.4). Der verbleibende Rest wird durch die höheren $2n$ -Spinonen-Zustände mit $n \geq 2$ erzeugt. Für $\Delta \rightarrow 1$ hingegen ist der Zwei-Spinonen-Anteil marginal.

7.2 Berechnung des Zwei-Spinonen-Anteils

Um nun den Zwei-Spinonen-Anteil zur dynamischen Suszeptibilität mit Hilfe der Resultate von Jimbo und Miwa aus [43] explizit zu berechnen, muss der Hamiltonoperator (3.4) der XXZ-Kette

auf die Form transformiert werden, wie sie von Jimbo und Miwa verwendet wird. Die Transformation ist gegeben durch $s_j^{x,y} \mapsto (-1)^j s_j^{x,y}$ und $s_j^z \mapsto s_j^z$. Damit folgt

$$H \mapsto H_{JM} = -J \sum_{j=1}^L (s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y - \Delta s_j^z s_{j+1}^z). \quad (7.6)$$

Die Funktion χ aus (7.3) lautet hiermit und mit Gleichung (7.2)

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{1}{n_g} \sum_g \langle g | \sum_{k=1}^L (-1)^k s_k^+(t) s_0^- | g \rangle dt, \quad (7.7)$$

wobei die Translationsinvarianz des Systems benutzt und obige Transformation eingesetzt wurde. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ ist der Grundzustand des Hamiltonoperators (7.6) für $\Delta > 1$ und verschwindendes Magnetfeld zweifach entartet, d. h. $n_g = 2$. Um weiter die Notation aus [43] anzupassen, werden die Operatoren s_j^\pm als σ_j^\pm und die beiden Grundzustände von H_{JM} als $|0\rangle_0, |0\rangle_1$ geschrieben,

$$\chi(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{k=-\infty \\ j=0,1}}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} {}_j \langle 0 | (-1)^k \sigma_k^+(t) \sigma_0^- | 0 \rangle_j dt. \quad (7.8)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die Zeitentwicklung $\sigma_k^+(t)$ mit dem transformierten Hamiltonoperator H_{JM} gebildet werden muss. Es wird nun die Identität (Gleichung (7.21) aus [43])

$$id_{\mathcal{F}} = \sum_{j=0,1} \sum_{n \geq 0} \sum_{\epsilon_n, \dots, \epsilon_1} \frac{1}{n!} \oint \frac{d\xi_n}{2\pi i \xi_n} \dots \oint \frac{d\xi_1}{2\pi i \xi_1} |\xi_n \dots \xi_1\rangle_{\epsilon_n \dots \epsilon_1, j} {}_j \langle \xi_1 \dots \xi_n | \quad (7.9)$$

zwischen die beiden Spinoperatoren in Gleichung (7.8) eingeschoben. Die n -Spinonen-Zustände $|\xi_n \dots \xi_1\rangle_{\epsilon_n \dots \epsilon_1, j}$ und der Raum \mathcal{F} werden in den Gleichungen (7.4), (7.16) und (7.17) aus [43] definiert. Die Parameter ϵ_i , $i = 1, \dots, n$, kennzeichnen den Spin des jeweiligen Spinons. Der Term mit $n = 2$ stellt den Zwei-Spinonen-Anteil dar und lautet

$$\chi^{(2)}(\omega) = \frac{1}{8} \sum_{\substack{j, j'=0,1 \\ \epsilon_1, \epsilon_2 = \pm}} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \oint \prod_{i=1}^2 \frac{d\xi_i}{2\pi i \xi_i} {}_{j'} \langle 0 | (-1)^k \sigma_k^+(t) | \xi_2, \xi_1 \rangle_{\epsilon_2 \epsilon_1, j} {}_j \langle \xi_1, \xi_2 | \sigma_0^- | 0 \rangle_{j'}. \quad (7.10)$$

Die Summe über ϵ_1 und ϵ_2 kann direkt ausgeführt werden, weil offensichtlich nur die Matrixelemente mit $\epsilon_1 = \epsilon_2 = -$ ungleich Null sind. Die ϵ -Indizes werden in der folgenden Notation unterdrückt.

Es werden Eigenzustände des Translationsoperators \hat{T} eingeführt,

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_0 + |0\rangle_1), \quad |\xi_2, \xi_1\rangle_{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\xi\rangle_0 + |\xi\rangle_1), \quad (7.11a)$$

$$|\pi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_0 - |0\rangle_1), \quad |\xi_2, \xi_1\rangle_{(\pi)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\xi\rangle_0 - |\xi\rangle_1), \quad (7.11b)$$

wobei $|\xi\rangle_i$ mit $i = 0, 1$ eine Kurznotation für $|\xi_2, \xi_1\rangle_i$ ist. Die Eigenwertgleichungen lauten wie folgt,

$$\hat{T}|\xi_2, \xi_1\rangle_{(0)} = e^{iP(\xi_1, \xi_2)}|\xi_2, \xi_1\rangle_{(0)}, \quad \hat{T}|\xi_2, \xi_1\rangle_{(\pi)} = -e^{iP(\xi_1, \xi_2)}|\xi_2, \xi_1\rangle_{(\pi)}, \quad (7.12a)$$

$$H_{JM}|\xi_2, \xi_1\rangle_{(0), (\pi)} = E(\xi_1, \xi_2)|\xi_2, \xi_1\rangle_{(0), (\pi)}, \quad (7.12b)$$

wobei die Energien und Impulse der Zwei-Spinonen-Zustände in der Form

$$E(\xi_1, \xi_2) = e(\xi_1) + e(\xi_2), \quad P(\xi_1, \xi_2) = p(\xi_1) + p(\xi_2) \quad (7.13)$$

geschrieben werden können. Werden die Variablen ξ_i durch die Rapiditäten θ_i ausgedrückt,

$$\xi_i = -ie^{i\theta_i}, \quad -\pi \leq \theta_i < \pi, \quad i = 1, 2, \quad (7.14)$$

so sind Energie und Impuls eines Spinons durch Jacobi-elliptische Funktionen gegeben [43],

$$e(\xi) = \hat{e}(\theta) = I \operatorname{dn} \left(\frac{2K}{\pi} \theta \right) \quad \text{mit} \quad I = \frac{JK}{\pi} \operatorname{sh} \left(\frac{\pi K'}{K} \right), \quad (7.15a)$$

$$p(\xi) = \hat{p}(\theta) = \operatorname{am} \left(\frac{2K}{\pi} \theta \right) - \frac{\pi}{2}. \quad (7.15b)$$

Der Anisotropieparameter $\Delta = (p + p^{-1})/2$ hängt über die Relation $p = \exp(-\pi K'/K)$ mit den elliptischen Integralen $K = K(k)$ und $K' = K(k')$ sowie den zugehörigen Moduli k und $k' = \sqrt{1 - k^2}$ zusammen.

Werden die Zustände (7.11) in die Matrixelemente von Gleichung (7.10) eingesetzt und die Eigenwertgleichungen (7.12b) benutzt, folgt nach einer kurzen Rechnung und Zurück einsetzen der ursprünglichen Zustände aus den Gleichungen (7.11)

$$\begin{aligned} & 2 \sum_{j, j'=0,1} j' \langle 0 | (-)^k \sigma_k^+(t) | \xi_2, \xi_1 \rangle_{\epsilon_2 \epsilon_1, j} \langle \xi_1, \xi_2 | \sigma_0^- | 0 \rangle_{j'} \\ & = e^{-iE(\xi_1, \xi_2)t} e^{i(P(\xi_1, \xi_2) + \pi)k} \left| {}_0 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_0 + {}_1 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_1 \right|^2 \\ & \quad + e^{-iE(\xi_1, \xi_2)t} e^{iP(\xi_1, \xi_2)k} \left| {}_0 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_0 - {}_1 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_1 \right|^2. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Die Summation über k und die Integration über t in Gleichung (7.10) können nun explizit ausgeführt werden und liefern Produkte von jeweils zwei δ -Funktionen

$$4\pi^2 \delta(\omega - E(\xi_1, \xi_2)) \delta(P(\xi_1, \xi_2) + \pi) \quad \text{bzw.} \quad 4\pi^2 \delta(\omega - E(\xi_1, \xi_2)) \delta(P(\xi_1, \xi_2)). \quad (7.17)$$

Die Integrationen über ξ_1 und ξ_2 entlang des Einheitskreises in der komplexen Ebene werden explizit ausgeführt, indem ξ_1 und ξ_2 durch θ_1 und θ_2 gemäß Gleichung (7.14) substituiert werden,

$$\oint \frac{d\xi_1}{2\pi i \xi_1} \oint \frac{d\xi_2}{2\pi i \xi_2} \longrightarrow \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 d\theta_2. \quad (7.18)$$

Dies liefert als Zwischenergebnis

$$\begin{aligned} \chi^{(2)}(\omega) = & \frac{1}{16} \iint_{-\pi}^{\pi} \left\{ \left| {}_0 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_0 + {}_1 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_1 \right|^2 \delta(\hat{P} + \pi) + \left| {}_0 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_0 - {}_1 \langle 0 | s_0^+ | \xi \rangle_1 \right|^2 \delta(\hat{P}) \right\} \\ & \times \delta(\omega - \hat{E}) d\theta_1 d\theta_2, \end{aligned} \quad (7.19)$$

wobei hier die Abhängigkeit der Funktionen \hat{E} und \hat{P} von den Parametern θ_1 und θ_2 gemäß der Gleichungen (7.13) und (7.15a) unterdrückt wurde. Um die Integrale über die Produkte der beiden δ -Funktionen auszuwerten, werden die Nullstellen ihrer Argumente bestimmt. Sie sind gegeben durch die Lösungen der Gleichungssysteme

$$\omega = \hat{E}(\theta_1, \theta_2), \quad 0 = \hat{P}(\theta_1, \theta_2) + \pi, \quad (7.20a)$$

$$\text{bzw. } \omega = \hat{E}(\theta_1, \theta_2), \quad 0 = \hat{P}(\theta_1, \theta_2), \quad (7.20b)$$

je nachdem welches Produkt der δ -Funktionen in (7.19) betrachtet wird. Die Lösungen dieser Gleichungssysteme werden in Anhang C.1 bestimmt. Der erste Fall führt auf $\theta := \theta_1^{(l)} = -\theta_2^{(l)}$, $l = 1, \dots, 4$, und damit $\xi_1 \xi_2 = -1$ sowie

$$\hat{\omega} := \frac{\omega}{2I} = \text{dn} \left(\frac{2K}{\pi} \theta \right), \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad (7.21)$$

für alle vier Lösungen. Analog führt der zweite Fall auf $\theta := \theta_1^{(l)} = \pm\pi - \theta_2^{(l)}$, $l = 1, \dots, 4$, und damit $\xi_1 \xi_2 = +1$ sowie auch auf Gleichung (7.21) für alle vier Lösungen.

Die entsprechenden Vorfaktoren vor den δ -Funktionen aus Gleichung (7.19) müssen für diese Lösungen ausgewertet werden. In Anhang C.2 wird gezeigt, dass sich das relative Minuszeichen in den Betragsquadraten wegen der beiden unterschiedlichen Vorzeichen von $\xi_1 \xi_2 = \mp 1$ gerade weghebt. Damit lautet das Betragsquadrat für alle acht Lösungen einheitlich

$$|B(\theta)|^2 = \left(\frac{2K}{\pi} \right)^2 k' \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)}. \quad (7.22)$$

Wegen der Regeln für die Integration mehrdimensionaler δ -Funktionen muss noch durch den Betrag der Jacobi-Determinante

$$J_d(\omega) = \left| \frac{\partial E}{\partial \theta_1} \frac{\partial P}{\partial \theta_2} - \frac{\partial E}{\partial \theta_2} \frac{\partial P}{\partial \theta_1} \right|_{\theta_1=\theta_1^{(l)}, \theta_2=\theta_2^{(l)}} \quad (7.23)$$

dividiert werden, wobei die Parameter $\theta_1^{(l)}$ und $\theta_2^{(l)}$, $l = 1, \dots, 4$, wieder die Lösungen der Gleichungssysteme (7.20) sind. Auch die Jacobi-Determinante liefert für alle acht Lösungen den gleichen Ausdruck, und zwar

$$J_d(\omega) = 2I \left(\frac{2K}{\pi} \right)^2 \hat{\omega} \sqrt{1 - \hat{\omega}^2} \sqrt{\hat{\omega}^2 - k'^2}, \quad k' < \hat{\omega} < 1. \quad (7.24)$$

Hierbei muss beachtet werden, dass Gleichung (7.21) für $\hat{\omega} < k'$ oder $\hat{\omega} > 1$ keine Lösung besitzt und damit die Integration über die δ -Funktionen Null liefert, sodass $\chi(\omega)$ in diesen Bereichen identisch verschwindet.

Addition aller acht Lösungen liefert schließlich einen Faktor 8 für $k' < \hat{\omega} < 1$, einen Faktor 4 für $\hat{\omega} = k'$ oder $\hat{\omega} = 1$ und Null sonst. Mit der Heaviside-Funktion $\Theta(x)$, die die Werte 1 für $x > 0$, $\frac{1}{2}$ für $x = 0$ und 0 sonst annimmt, folgt damit für den Zwei-Spinonen-Anteil $\chi^{(2)}$ des positiven Teils der dynamischen Suszeptibilität

$$\chi^{(2)}(\omega) = \frac{k'}{4I} \frac{\Theta(\hat{\omega} - k') \Theta(1 - \hat{\omega})}{\hat{\omega} \sqrt{1 - \hat{\omega}^2} \sqrt{\hat{\omega}^2 - k'^2}} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} \quad (7.25a)$$

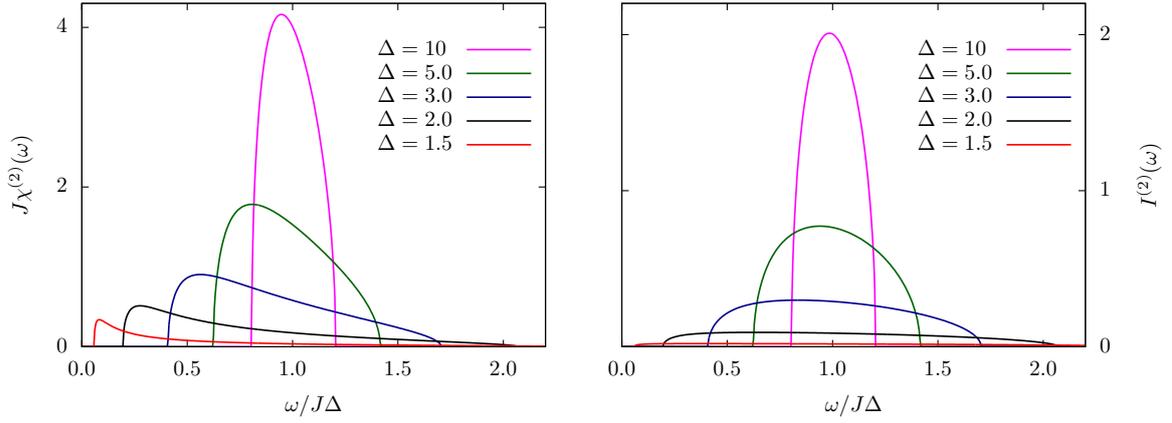


Abb. 7.1: Zwei-Spinonen-Anteile $J\chi^{(2)}$ und entsprechende Intensitäten $I^{(2)}$ als Funktion von $\omega/J\Delta$ für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ .

mit

$$\vartheta_n(\theta) = \frac{\vartheta_4(\theta, p)}{\vartheta_4(0, p)}, \quad (7.25b)$$

$$\vartheta_A^2(\theta) = \frac{\gamma(\xi^4)\gamma(\xi^{-4})}{\gamma(p^{-2})\gamma(p^{-2})}, \quad \xi = -ie^{i\theta}, \quad (7.25c)$$

$$\gamma(u) = \frac{(p^4u, p^4, p^4)(u^{-1}, p^4, p^4)}{(p^6u, p^4, p^4)(p^2u^{-1}, p^4, p^4)}, \quad (7.25d)$$

$$(x, y, z) = \prod_{m,n=0}^{\infty} (1 - xy^m z^n). \quad (7.25e)$$

Die Variablen $\hat{\omega}$ und θ in (7.25a) hängen durch die Relation (7.21) zusammen und sind eindeutig durch den Wert von ω bestimmt. Der Anisotropieparameter $\Delta = (p + p^{-1})/2$ legt die Moduli k und k' sowie die elliptischen Integrale K und K' fest.

Die Linienform der Funktion $\chi^{(2)}$ ist in Abbildung 7.1 für verschiedene Werte von Δ gezeigt. Es lässt sich speziell für kleine Δ ein relativ breiter und extrem asymmetrischer Resonanzpeak beobachten. Für anwachsende Werte von Δ wird der Peak schmäler und symmetrischer. Der Grenzübergang $\Delta \rightarrow \infty$ wird im nächsten Abschnitt untersucht.

7.3 Ising-Limes

Da der Hamiltonoperator H_{JM} aus Gleichung (7.6) im Ising-Limes $\Delta \rightarrow \infty$ divergiert, ist es notwendig, alle Energien mit dem Faktor Δ zu skalieren. Wird in (7.6) die Energie J durch J/Δ ersetzt und danach der Limes $\Delta \rightarrow \infty$ durchgeführt, so wird aus H_{JM} der Hamiltonoperator (A.7) des eindimensionalen Ising-Modells.

In dem Ausdruck (7.25a) für $\chi^{(2)}$ betrifft diese Skalierung ausschließlich die Definition (7.15a) von I , in der J durch J/Δ ersetzt werden muss. Alle anderen Relationen (7.25b)–(7.25e) und insbesondere (7.21) für $\hat{\omega}$ bleiben unverändert. Wegen $\Delta = (p + p^{-1})/2$ folgt $p \rightarrow 0$ und daraus

$k \rightarrow 0$, $k' \rightarrow 1$, $K \rightarrow \pi/2$ sowie $K' \rightarrow -\frac{1}{2} \ln(p) \rightarrow \infty$. Die skalierte Größe I wird zu

$$I = \frac{JK}{\pi\Delta} \operatorname{sh}(\pi K'/K) \rightarrow -\frac{Jp - p^{-1}}{2p + p^{-1}} \rightarrow \frac{J}{2}. \quad (7.26)$$

Einerseits stellt das Produkt der beiden Heaviside-Funktionen im Zähler von Gleichung (7.25a) sicher, dass $\chi^{(2)}(\omega) = 0$ für alle $\omega \neq J$, andererseits gilt $\int_{-\infty}^{\infty} \chi^{(2)}(\omega) d\omega = \pi/2$, wie in Anhang C.3 gezeigt wird. Damit ist $\chi^{(2)}$ eine δ -Funktion mit dem Vorfaktor $\pi/2$,

$$\chi^{(2)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \delta(\omega - J). \quad (7.27)$$

Dieses Resultat stimmt mit Gleichung (A.24a) aus Anhang A.3 für $h = T = 0$ überein. Für die integrierte Intensität gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega}{2} \chi''_{+-}(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} \omega \chi^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{\pi J}{2}, \quad (7.28)$$

was auch aus (A.24b) gefolgert werden kann.

7.4 Isotroper Limes und integrierte Intensität

Der isotrope Limes $\Delta \rightarrow 1$ führt auf $p \rightarrow 1$ und damit $k \rightarrow 1$, $k' \rightarrow 0$, $K' \rightarrow \pi/2$ sowie $K \rightarrow \infty$. Abbildung 7.1 zeigt, dass die Funktion $\chi^{(2)}$ in diesem Grenzfall identisch verschwindet. Dies steht in keinem Widerspruch zu dem Verhalten von χ''_{+-} im isotropen Limes,

$$\chi''_{+-}(\omega) = \pi m(0, T) \delta(\omega), \quad (7.29)$$

weil der Vorfaktor $m(0, T)$ für alle Temperaturen T verschwindet.

Um für alle Anisotropien $\Delta > 1$ ein Maß für den prozentualen Anteil von $\chi^{(2)}$ an der gesamten Funktion χ zu erhalten, wird der Zwei-Spinonen-Anteil $I_0^{(2)}$ der integrierten Intensität mit der gesamten integrierten Intensität I_0 verglichen. Das Verhältnis aus diesen beiden Größen,

$$r = I_0^{(2)}/I_0 \quad \text{mit} \quad I_0^{(2)} = \int_0^{\infty} \omega \chi^{(2)}(\omega) d\omega \quad \text{und} \quad I_0 = \int_0^{\infty} \omega \chi(\omega) d\omega, \quad (7.30)$$

hängt parametrisch von Δ ab und liegt stets zwischen 0 und 1. Es wird speziell im isotropen Limes $\Delta \rightarrow 1$ untersucht. Wenn mit Hilfe der Relation (7.21) die Variable ω durch θ substituiert wird, lautet der Zähler aus Gleichung (7.30)

$$I_0^{(2)} = \frac{2k'KI}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} d\theta. \quad (7.31)$$

Das Integral auf der rechten Seite kann mit hoher numerischer Genauigkeit berechnet werden. Die Integrandenfunktion $\vartheta_A^2(\theta)/\vartheta_n^2(\theta)$ ist im linken Teil der Abbildung 7.2 als Funktion von $\beta = 2K\theta/\pi$ für verschiedene Anisotropien dargestellt. Für große Werte von Δ ist die $2K$ -Periodizität des Integranden gut zu erkennen. Im isotropen Limes $\Delta \rightarrow 1$ nähert sich die Integrandenfunktion der Grenzfunktion $f(\beta)$ aus Anhang C.4 an. Dort wird auch das asymptotische Verhalten des Integrals (7.31) im isotropen Limes analytisch bestimmt zu

$$I_0^{(2)} \xrightarrow{\Delta \rightarrow 1} C e^{-\frac{\pi^2}{2(1-p)}} (1 + \mathcal{O}(1-p)) \quad \text{mit} \quad C = 124.857\dots \quad (7.32)$$

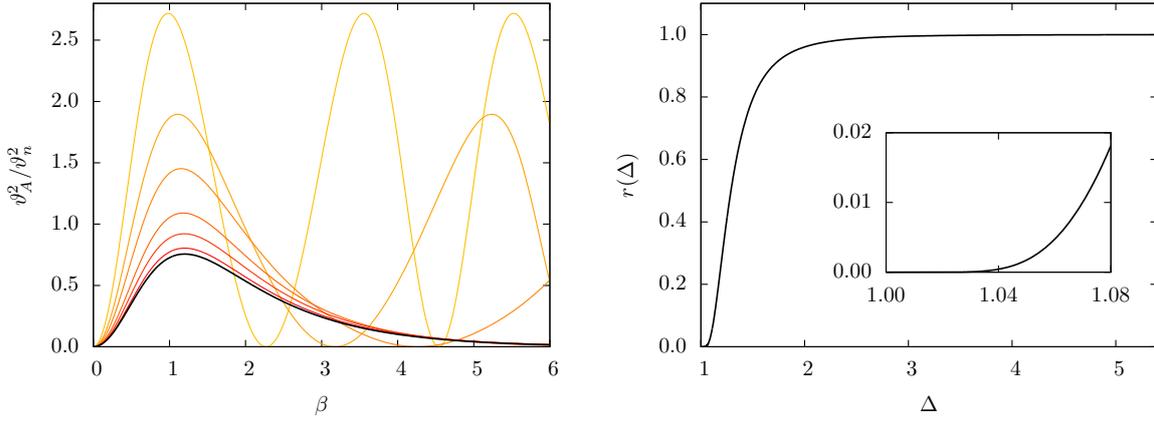


Abb. 7.2: Links: Integrandenfunktion $\vartheta_A^2(\theta)/\vartheta_n^2(\theta)$ als Funktion von $\beta = 2K\theta/\pi$ für verschiedene Werte des Anisotropieparameters Δ , farblich gekennzeichnet durch Abstufungen von gelb bis rot, verglichen mit der Grenzfunktion $f(\beta)$ aus Anhang C.4 (schwarze Kurve). Rechts: Verhältnis r als Funktion des Anisotropieparameters $\Delta > 1$ und speziell das Verhalten in der Nähe des isotropen Punktes $\Delta = 1$.

Für den Nenner in (7.30) wird eine Summenregel benutzt,

$$I_0 = \frac{\pi\delta J}{2} (\langle\sigma_1^x\sigma_2^x\rangle - \langle\sigma_1^z\sigma_2^z\rangle). \quad (7.33)$$

Mit den Gleichungen (28), (34) und (35) der Arbeit [97] von Takahashi et al. können die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen auf der rechten Seite durch Integrale ausgedrückt werden. Es gilt

$$\langle\sigma_1^z\sigma_2^z\rangle - \langle\sigma_1^x\sigma_2^x\rangle = 1 - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{3 \sin^2 x \operatorname{ch}^4 \frac{\eta}{2} + \cos^2 x \operatorname{sh}^4 \frac{\eta}{2} - \frac{x}{\eta} (\operatorname{ch}^2 \frac{\eta}{2} + \frac{1}{2}) \sin 2x \operatorname{sh} \eta}{\eta \operatorname{ch} \left(\frac{\pi x}{\eta} \right) (\operatorname{sh}^2 \frac{\eta}{2} + \sin^2 x)^2} dx, \quad (7.34)$$

wobei der Parameter η durch $\Delta = \operatorname{ch} \eta$ definiert ist. Eine Entwicklung um den isotropen Punkt $\eta = 0$ liefert nach einer kurzen Rechnung

$$I_0 \sim \frac{(7 - 4 \ln 2)\pi J}{120} \eta^4. \quad (7.35)$$

Demnach geht die gesamte integrierte Intensität I_0 im isotropen Limes gegen Null, aber längst nicht so schnell wie der Zwei-Spinonen-Anteil $I_0^{(2)} \sim e^{-\pi^2/2(1-p)}$ mit $p = \Delta - \sqrt{\Delta^2 - 1}$. Es wird vermutet, dass in der Nähe des isotropen Punktes alle Multi-Spinonen-Anteile $\chi^{(2n)}$, $n \geq 2$, genauso verschwinden wie $\chi^{(2)}$, und zwar derart, dass für die gesamte Funktion nach wie vor $\chi = \sum_{n \geq 1} \chi^{(2n)}$ gilt.

Das Verhältnis r aus Gleichung (7.30) ist im rechten Teil der Abbildung 7.2 dargestellt. Für $\Delta \rightarrow 1$ ist der überexponentielle Zerfall (7.32) deutlich zu erkennen. Für $\Delta > 3/2$ beträgt der Zwei-Spinonen-Anteil mehr als 80%, für $\Delta > 2$ sogar mehr als 96%. Für größer werdende Δ nähert er sich sehr schnell den 100% an. Im Ising-Limes $\Delta \rightarrow \infty$ ist $r = 1$, d.h. die gesamte Suszeptibilität χ wird vollständig durch die Zwei-Spinonen-Anregungen beschrieben.

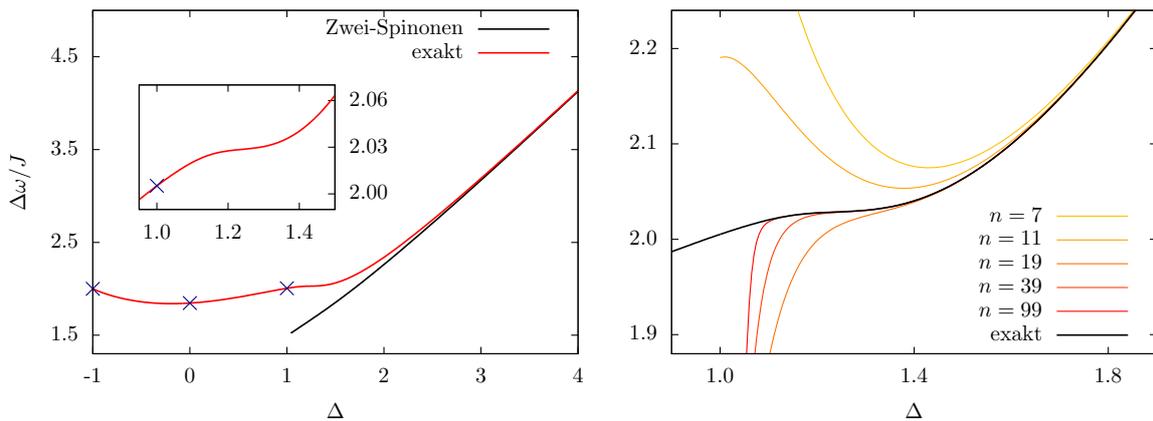


Abb. 7.3: Links: Vergleich der Linienbreite $\Delta\omega/J$ des Zwei-Spinonen-Anteils mit der exakten Linienbreite als Funktion des Anisotropieparameters für $T = h = 0$. Die blauen Kreuze kennzeichnen die speziellen Werte aus den Gleichungen (7.36).

Rechts: Entwicklung der exakten Linienbreite $\Delta\omega/J$ gemäß Gleichung (7.38) bis zur n -ten Ordnung.

7.5 Vergleich der Linienbreite des Zwei-Spinonen-Anteils mit der exakten Linienbreite

In diesem Abschnitt wird die Linienbreite des Zwei-Spinonen-Anteils mit der Linienbreite der exakten absorbierten Intensität verglichen. Hierzu werden in den Ausdrücken für φ , ω und ω' aus Abschnitt 3.2 die Parameter $T = h = 0$ gesetzt. Alle Integrale, deren Integranden eine der Lösungen \mathfrak{b} , $\bar{\mathfrak{b}}$ der nichtlinearen Integralgleichungen beinhalten, verschwinden, und φ , ω und ω' sind durch die expliziten Ausdrücke der *Driving*-Terme gegeben. Die Formel (4.5b) für die Linienbreite vereinfacht sich zu $\Delta\omega/J = \sqrt{m_3/m_1}$, wobei die Momente m_1 und m_3 gemäß der Gleichungen (4.12) für $T = h = 0$ durch die *Driving*-Terme explizit bestimmt sind.

Dieses Ergebnis kann mit dem Resultat für die Korrelationsfunktionen des Grundzustands der Arbeit [48] von Kato et al. verglichen werden. Abbildung 7.3 zeigt die auf den Formeln aus [48] basierende exakte Linienbreite als Funktion des Anisotropieparameters $\Delta \geq -1$. Diese stimmt mit der Linienbreite $\Delta\omega/J = \sqrt{m_3/m_1}$, die mit der Momentenmethode aus Kapitel 4 berechnet wurde, exakt überein, weshalb diese in Abbildung 7.3 nicht dargestellt ist. Im kritischen Bereich verhält sich die exakte Linienbreite nichtmonoton, wohingegen sie im massiven Bereich monoton ansteigt. Eine Besonderheit ergibt sich für Werte von Δ knapp über Eins, wo die exakte Linienbreite ein Plateau ausbildet. Nah am isotropen Punkt und für große Werte von Δ steigt sie linear an.

Für den Fall, dass p , definiert über $\Delta = (p + p^{-1})/2$, eine Einheitswurzel (*root of unity*) ist, nehmen die Momente m_1 und m_3 spezielle Werte an [48]. Diese lauten z. B. für $\Delta = -1, 0, 1$

$$\Delta = -1: \quad m_1 = 1/2, \quad m_3 = 2, \quad (7.36a)$$

$$\Delta = 0: \quad m_1 = \frac{2(\pi - 2)}{\pi^2}, \quad m_3 = \frac{64 - 48\pi - 6\pi^2 + 27\pi^3}{9\pi^4}, \quad (7.36b)$$

$$\Delta = 1 : \quad m_1 = \frac{7 - 4 \ln 2}{15}, \quad (7.36c)$$

$$m_3 = \ln(2)(20\zeta(5) - 10\zeta(3) - 4) - \frac{65}{4}\zeta(5) - \frac{18}{5}\zeta^2(3) + \frac{169}{10}\zeta(3) - \frac{2}{5},$$

wobei ζ die Riemannsche Zeta-Funktion ist. Die numerischen Werte der Linienbreite an diesen Stellen ergeben sich demnach zu $\Delta\omega/J = 2$ für $\Delta = -1$, $\Delta\omega/J \approx 1.84606$ für $\Delta = 0$ und $\Delta\omega/J \approx 2.00518$ für $\Delta = 1$. Die exakte Linienbreite als Funktion von Δ ist an den isotropen Punkten $\Delta = \pm 1$ genau genommen nicht definiert, ist dort aber stetig fortsetzbar und ungleich Null, wie die zugehörige Kurve im linken Diagramm der Abbildung 7.3 zeigt.

Für den Zwei-Spinonen-Anteil können die Momente m_1 und m_3 durch die Integrale

$$m_n = \frac{(2I)^n k' K}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left[\operatorname{dn} \left(\frac{2K\theta}{\pi} \right) \right]^{n-1} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} d\theta \quad (7.37)$$

ausgedrückt werden, die mit extrem hoher numerischer Genauigkeit berechnet werden können.

Die Linienbreite des Zwei-Spinonen-Anteils ist in Abbildung 7.3 als Funktion von $\Delta > 1$ dargestellt und wird dort mit dem exakten Ergebnis verglichen. Wie in Abschnitt 7.3 gezeigt wurde, stimmen der Zwei-Spinonen-Anteil und die gesamte dynamische Suszeptibilität im Ising-Limes $\Delta \rightarrow \infty$ überein, was sich natürlich auf die Linienbreiten überträgt. Eine Entwicklung in $a = 1/\Delta$ der beiden mit Δ skalierten Linienbreiten liefert

$$\frac{\Delta\omega}{\Delta} = \frac{1}{\Delta} \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} = \begin{cases} 1 + \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{8}a^4 - \frac{1}{8}a^6 - \frac{3}{128}a^8 + \dots & \text{(Zwei-Spinonen)} \\ 1 + \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{2}a^4 + \frac{3}{8}a^5 + \frac{19}{64}a^7 + \dots & \text{(exakt)} \end{cases}, \quad (7.38)$$

die bis zur zweiten Ordnung einschließlich übereinstimmen. Im rechten Diagramm der Abbildung 7.3 sind die Entwicklungen (7.38) der exakten Linienbreite für verschiedene Ordnungen dargestellt.

7.6 Vergleich mit numerischen Rechnungen

Abschließend zur Untersuchung des Zwei-Spinonen-Anteils $\chi^{(2)}$ der dynamischen Suszeptibilität aus Gleichung (7.25a) wird selbiger mit der gesamten dynamischen Suszeptibilität verglichen, die mit der in Kapitel 5 beschriebenen Methode für endliche Kettenlängen von $L = 24$ und $L = 32$ berechnet wurde. Zu diesem Zweck werden numerischen Daten für χ_{+-}'' als Funktion von ω bei $h = 0$ für $\Delta = 2$ benutzt. Die in den numerischen Rechnungen verwendete Kettenlänge L wird durch einen Index an der Funktion gekennzeichnet, χ_L'' . Wie in Abschnitt 7.4 gesehen, sollte für $\Delta = 2$ der Zwei-Spinonen-Anteil schon über 96% der gesamten dynamischen Suszeptibilität χ_L'' im Limes $T \rightarrow 0$ ausmachen, sofern *Finite-Size-Korrekturen* vernachlässigt werden können. Für größere Temperaturen werden Abweichungen hiervon erwartet.

Der Grenzfall $T \rightarrow 0$ erfordert eine spezielle Behandlung der numerischen Methode. Für endliche Ketten ist der Grundzustand mit Energie E_0 nichtentartet und besitzt für ein durch 4 teilbares L einen Impuls von $q = 0$. Tatsächlich ist die Energielücke $\Delta E = E_\pi - E_0$ zu dem tiefliegenden $q = \pi$ -Zustand sehr klein im Vergleich zu allen anderen Lücken. Im thermodynamischen Limes schließt sich diese kleine Lücke, und diese beiden nunmehr entarteten Grundzustände sind nach wie vor vom Rest des Spektrums durch eine endliche Energielücke getrennt. Für einen besseren

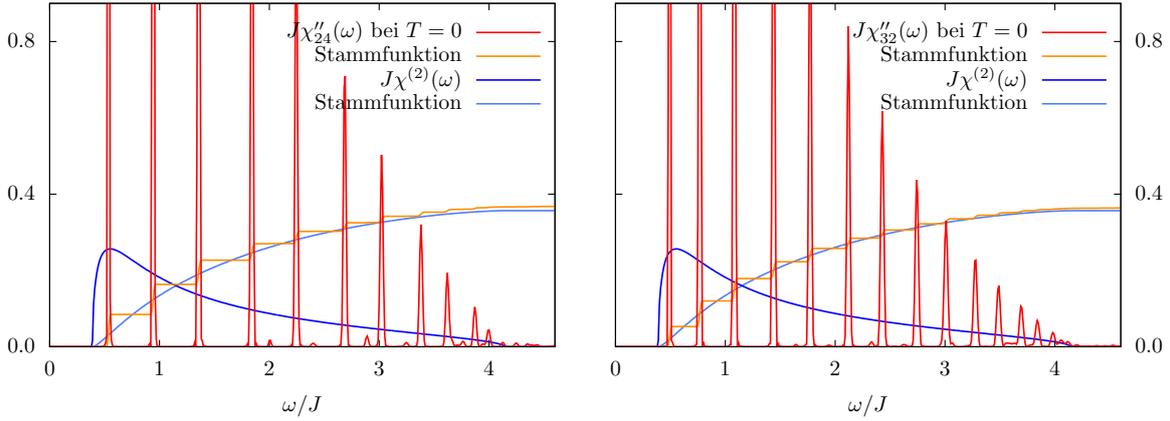


Abb. 7.4: Zwei-Spinonen-Anteil $J\chi^{(2)}$ als Funktion der Frequenz für $\Delta = 2$, verglichen mit der entsprechenden dynamischen Suszeptibilität $J\chi_L''$ für $T = h = 0$ und endliche Kettenlängen ($L = 24$ links, $L = 32$ rechts). Die orangenen bzw. hellblauen Linien stellen die entsprechenden Stammfunktionen $\int_0^\omega \chi_L''(\omega')d\omega'$ und $\int_0^\omega \chi_{+-}''(\omega')d\omega'$ dar.

Vergleich mit dem Zwei-Spinonen-Anteil wird demnach über beide Zustände mit den Impulsen $q = 0$ und $q = \pi$ gemittelt.

Das Resultat für χ_{24}'' und χ_{32}'' ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Für tiefe Temperaturen bestehen die dynamischen Suszeptibilitäten χ_{24}'' und χ_{32}'' (rote Linien) aus einer Vielzahl von sehr scharfen Peaks, deren Einhüllende allerdings eine Ein-Peak-Struktur aufweist. Sie können demnach als näherungsweise unimodal bezeichnet werden (siehe hierzu Abschnitt 2.3.2). Die Viel-Peak-Struktur resultiert aus der endlichen Kettenlänge und der kleinen Anzahl von Zuständen, die für $T = 0$ einen Beitrag liefern. Mit ansteigender Temperatur unterdrücken die Boltzmann-Faktoren $\exp(-E_n/T) - \exp(-E_m/T)$ aus Gleichung (2.31) immer weniger Zustände, bis schließlich die Dichte der Peaks größer als die numerische Auflösung der Chebyshev-Entwicklung wird, die umgekehrt proportional zur Entwicklungsordnung M ist (siehe [111] und Abschnitt 5.1). Die dynamische Suszeptibilität wird dann zu einer glatten Kurve, wie es in den Abbildungen 7.5 und 6.2 dargestellt ist. Weiterhin kann in Abbildung 7.5 beobachtet werden, dass selbst für mittlere Temperaturbereiche $T/J = 0.5 \dots 1.0$ die Zwei-Spinonen-Kurve für weite Teile des Frequenzbereichs eine gute Näherung der gesamten dynamischen Suszeptibilität darstellt. Für sehr große und kleine Frequenzen verschwindet der Zwei-Spinonen-Anteil wegen der Heaviside-Funktionen in Gleichung (7.25a) identisch, wohingegen die numerischen Daten deutlich von Null verschieden sind. Die mit $2T/\omega\pi$ skalierte dynamische Suszeptibilität (siehe Kapitel 6 und Anhang B.5) besitzt für hohe Temperaturen einen großen zentralen Peak bei $\omega = h = 0$ und zwei kleine Satelliten-Peaks bei $\omega = \pm J$ (siehe das untere rechte Diagramm in Abbildung A.1).

Ein ähnliches Verhalten kann für größer werdende Kettenlängen L beobachtet werden. Ein Vergleich der beiden Diagramme aus Abbildung 7.4 zeigt deutlich, dass mit wachsendem L die Viel-Peak-Struktur von χ_L'' enger wird. Zusätzlich schrumpfen die absoluten Höhen der einzelnen Peaks. Obwohl χ_L'' (rote Linien) und $\chi^{(2)}$ (dunkelblaue Linie) sehr verschieden aussehen, stimmen die Stammfunktionen dieser beiden Funktionen (orangene und hellblaue Linie) fast überein. Dies deutet darauf hin, dass die Stufenfunktion $\int_0^\omega \chi_L''(\omega')d\omega'$ (orangene Linie) gleichmäßig gegen die Stammfunktion $\int_0^\omega \chi_{+-}''(\omega')d\omega'$ konvergiert. Dies lässt für den thermodynamischen Li-

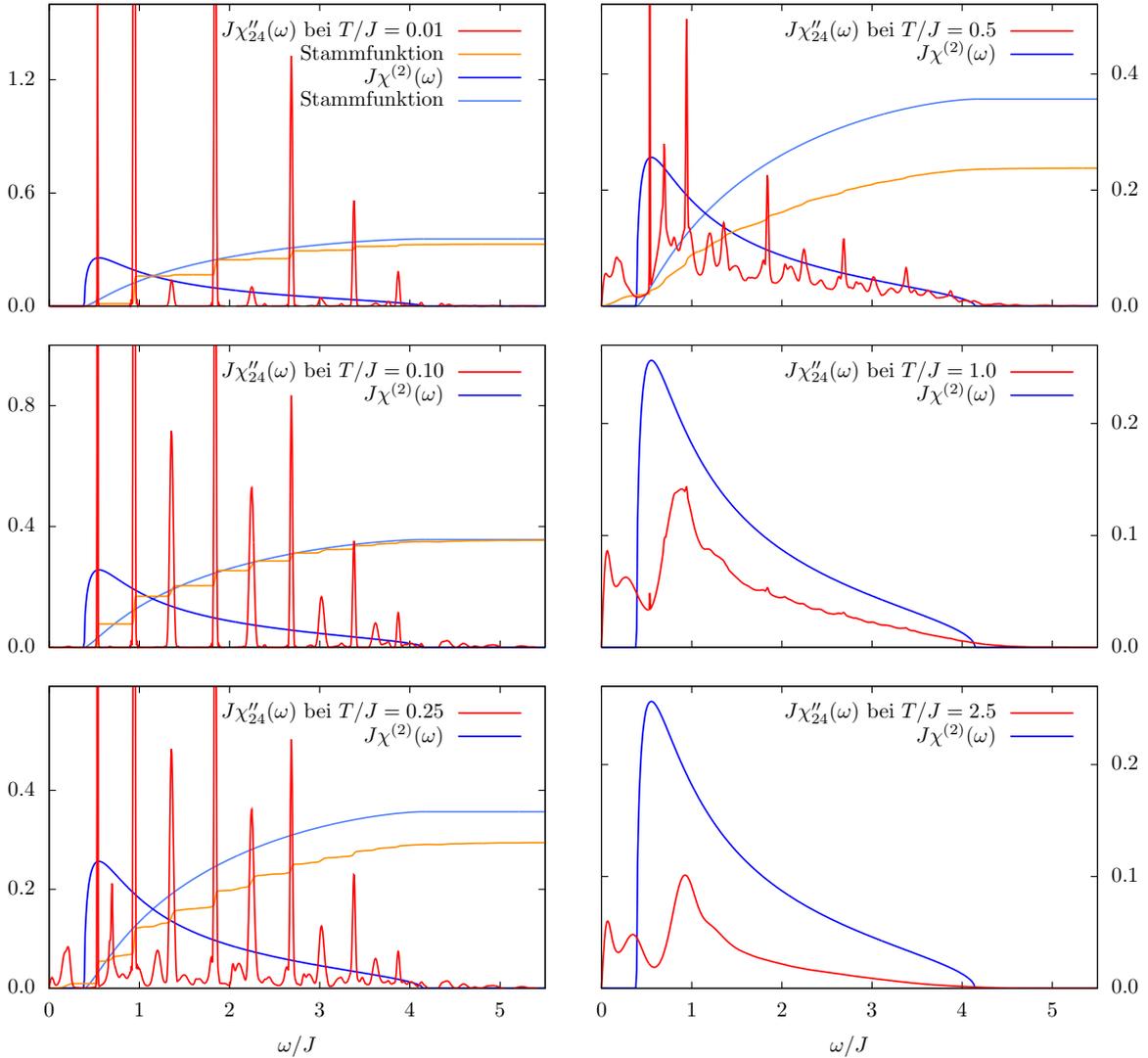


Abb. 7.5: Zwei-Spinonen-Anteil $J\chi^{(2)}$ (dunkelblaue Linie) als Funktion der Frequenz für $\Delta = 2$, verglichen mit der entsprechenden dynamischen Suszeptibilität $J\chi''_{24}$ für $h = 0$ und verschiedene endliche Temperaturen (rote Linien). Beachte die unterschiedlichen Skalierungen an den vertikalen Achsen.

mes $L \rightarrow \infty$ erwarten, dass die Viel-Peak-Struktur zu einer Ein-Peak-Struktur verschmiert, deren glatte Kurve der des Zwei-Spinon-Anteils $\chi^{(2)}$ sehr nahe kommt.

Die numerisch berechneten Kurven der dynamischen Suszeptibilität zeigen für tiefe Temperaturen eine starke Abhängigkeit von der Kettenlänge, und es ist deutlich zu erkennen, dass das Energiespektrum des endlichen Systems diskret ist. Im Gegensatz dazu scheinen die Momente der dynamischen Suszeptibilität und andere über den gesamten Frequenzbereich integrierte Größen durch die numerischen Daten sehr gut approximiert werden zu können.

8 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Phänomen der Mikrowellenabsorption des eindimensionalen anisotropen Spin-1/2-Heisenberg-Modells, welches einem longitudinalen Magnetfeld der Stärke h ausgesetzt wird, untersucht. Dieses Modell wird durch den Hamiltonoperator der XXZ-Kette mit Zeeman-Term $-hS^z$ beschrieben und ist in speziellen quasi-eindimensionalen antiferromagnetischen Materialien realisiert. Mit Hilfe der ESR-Spektroskopie kann für solche Materialien die Absorption der Mikrowellen mit Frequenz ω in Form der absorbierten Intensität bzw. ihrer Ableitung gemessen werden.

Die absorbierte Intensität lässt sich im Rahmen der Theorie der linearen Antwort durch die dynamische Suszeptibilität ausdrücken, die bislang nur in speziellen Grenzfällen der XXZ-Kette direkt zugänglich ist. Neben dem Paramagneten und dem $SU(2)$ -symmetrischen Modell, für die die dynamische Suszeptibilität durch eine δ -Funktion mit Argument $\omega - h$ gegeben ist, wurde in dieser Arbeit der Ising-Grenzfall der XXZ-Kette näher untersucht und eine explizite Darstellung der dynamischen Suszeptibilität hergeleitet. Die auftretende Drei-Peak-Struktur konnte dabei durch die *Domain-Wall*-Anregungen des eindimensionalen Ising-Modells erklärt werden.

Für die XXZ-Kette mit beliebiger Anisotropie hingegen ist das volle Absorptionsspektrum bislang theoretisch nicht zugänglich. Im Rahmen dieser Arbeit konnte jedoch gezeigt werden, dass zwei das Absorptionsspektrum charakterisierende Parameter, d. h. die Resonanzverschiebung und die Linienbreite, exakt berechnet werden können. Hierzu wurden diese ESR-Parameter über die Momente der absorbierten Intensität definiert und durch statische kurzreichweitige Korrelationsfunktionen ausgedrückt. Die Ergebnisse zur Linienbreite stellen eine Erweiterung der Momentenmethode von Van Vleck dar, der nur den Fall unendlich hoher Temperatur untersucht hat [106]. Inwieweit die erweiterte Momentenmethode auch für allgemeinere Modelle als die XXZ-Kette anwendbar ist, hängt davon ab, ob deren Korrelationsfunktionen für beliebige Temperaturen berechnet werden können. Unabhängig davon zeigt diese Methode, dass die absorbierte Intensität keine *heavy tails* besitzen kann, denn in der Regel existieren die kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen im thermodynamischen Limes. Insbesondere kann sie dann nicht die Gestalt einer Cauchy-Lorentz-Verteilung annehmen.

Die statischen kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette können aufgrund der Integrabilität und unter Zuhilfenahme der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen aus Kapitel 3 exakt bestimmt werden. Mit Hilfe der Momentenmethode aus Kapitel 4 konnten somit die beiden ESR-Parameter der XXZ-Kette für beliebige Temperaturen T , Magnetfelder h und Anisotropieparameter δ exakt berechnet werden. Hierbei muss allerdings beachtet werden, dass es einen entscheidenden Unterschied macht, ob die absorbierte Intensität als Funktion der Frequenz ω der eingestrahlten Mikrowelle bei konstantem Magnetfeld h interpretiert wird (ω -Richtung), oder umgekehrt (h -Richtung). Der zweite Fall passt zur Situation, wie sie typischerweise in ESR-Experimenten vorliegt, weil dort nämlich ω festgehalten und h variiert wird.

Bei der Berechnung der ESR-Parameter in ω -Richtung für verschiedene Bereiche von T , h und δ wurde deutlich, dass die in der Literatur verwendete Formel (2.52) die Resonanzverschiebung der absorbierten Intensität nur in speziellen Grenzfällen beschreibt, weil sie nämlich die Verschie-

bung der dynamischen Suszeptibilität und nicht die der absorbierten Intensität darstellt, und sich diese beiden Funktionen um einen Faktor $\omega/2$ unterscheiden. Außerdem wurde im Rahmen dieser Arbeit die numerische Methode zur Berechnung der Momente der dynamischen Suszeptibilität deutlich verbessert, indem eine Mittelung im Raum der Chebychev-Entwicklungskoeffizienten durchgeführt wurde (siehe Abschnitt 5.1 und [21]). Dass dies wirklich eine Verbesserung darstellt, konnte durch einen Vergleich der numerischen Daten in ω -Richtung mit den exakten Ergebnissen der Linienbreite gezeigt werden. Die gute Übereinstimmung der numerischen Daten mit den exakten Rechnungen der ω -Richtung erzeugt großes Vertrauen in die verwendete numerische Methode.

Dahingegen führt die Momentenmethode für die ESR-Parameter in h -Richtung auf Ausdrücke, die unendlich viele Korrelationsfunktionen beliebiger Reichweite enthalten. Dementsprechend sind in diesem Zugang keine exakten Berechnungen möglich. Stattdessen wurden die ESR-Parameter in h -Richtung für verschiedene physikalische Parameter T , h und δ numerisch und in den Grenzfällen hoher Temperatur und kleiner Anisotropie zusätzlich analytisch untersucht.

Sowohl die Hochtemperatur-Entwicklung als auch die numerischen Berechnungen der Linienbreite in h -Richtung zeigen, dass diese als Funktion der Temperatur ein zur ω -Richtung qualitativ unterschiedliches Verhalten zeigt. Während sie in ω -Richtung für tiefe Temperaturen von Null verschieden ist, lassen die numerischen Daten erkennen, dass sie in h -Richtung linear gegen Null geht. Die diesen Rechnungen zugrunde liegenden numerischen Daten wurden dadurch gewonnen, dass ein und derselbe Datensatz einer zweidimensionalen Funktion in unterschiedliche Richtungen numerisch integriert wurde.

Eine weitere Diskrepanz zwischen den unterschiedlichen Richtungen konnte auch im Grenzfall hoher Temperaturen beobachtet werden. So ist in diesem Limes die normierte absorbierte Intensität in h -Richtung durch die skalierte dynamische Suszeptibilität ϕ gegeben, die nur von der Differenz $\omega - h$ abhängt, symmetrisch in $\omega - h$ ist und im Parameterbereich $-1 \leq \delta \leq 1/4$ aus nur einem einzigen Peak besteht. Dahingegen sorgt in ω -Richtung der zusätzliche Faktor $\pi\omega^2/4T$, der sich zum einen aus dem Skalierungsfaktor $\pi\omega/2T$ und zum anderen aus dem Faktor $\omega/2$ ergibt, für eine asymmetrische bimodale Linienform. Diese Tatsache konnte zudem am Beispiel des XX-Modells gezeigt werden. Hier ist die Funktion ϕ explizit bekannt und in h -Richtung durch eine Gaußverteilung mit Mittelwert ω und Standardabweichung $|\delta|/\sqrt{2}$ gegeben. Der zusätzliche Faktor ω^2 führt damit zu einer Linienform mit zwei lokalen Maxima, wobei im Grenzfall großer Magnetfelder die Verteilung näherungsweise unimodal ist, weil das spektrale Gewicht des Peaks im negativen Frequenzbereich vernachlässigbar klein ist. Die Linienbreite in h -Richtung ist konstant, wohingegen die in ω -Richtung vom Magnetfeld abhängt und für große Felder gegen eine Konstante geht.

Für $-1 \leq \delta \leq 1/4$ konnte zudem die Funktion ϕ durch eine normal-inverse Gaußverteilung (NIG) ziemlich gut genähert werden (siehe Abschnitt 6.2), wobei die beiden Parameter der NIG durch eine Identifikation der untersten Momente bestimmt wurden und durch den Wert von δ gegeben sind. Insbesondere die gute Übereinstimmung des exponentiellen Abfalls der Funktion kommt dabei automatisch zustande und ist kein Ergebnis einer Anpassung der Parameter. Für die beiden Spezialfälle $\delta = -1$ und $\delta = 0$ ergibt sich aus der NIG das analytisch bekannte Resultat der Gaußverteilung und des δ -Peaks. Weiterhin konnte anhand der NIG gezeigt werden, dass es Verteilungen gibt, für die die über die Momente definierte Linienbreite von der typischerweise in ESR-Experimenten gemessenen *Peak-to-Peak*-Breite abweicht. Für die oben beschriebene spezielle Wahl der Parameter der NIG ergibt sich ein qualitativ unterschiedliches Verhalten beider Breiten als Funktion des Anisotropieparameters δ , insbesondere für kleine Werte. Hierbei verhält sich die

Peak-to-Peak-Breite ähnlich zu der Linienbreite (2.48) von Oshikawa und Affleck [89].

Falls experimentelle Daten durch eine NIG beschrieben werden können, kann somit aus dem Verhältnis der beiden Linienbreiten der Anisotropieparameter δ bestimmt werden, ohne den Wert der Spinkopplungskonstante J zu kennen. Ein Vergleich mit experimentellen Resultaten zeigt, dass der über die *Peak-to-Peak*-Breite der NIG ermittelte Wert von δ zum gemessenen Wert der Anisotropie einigermaßen passt.

Neben den analytischen Untersuchungen zur NIG und den generellen Überlegungen aus Abschnitt 2.3 konnte in Abschnitt 5.2 anhand der numerischen Berechnungen der Funktion ϕ für $\delta = -0.1$ im Hochtemperaturbereich gezeigt werden, dass es neben der Diskrepanz zwischen den beiden Integrationsrichtungen auch noch einen merklichen Unterschied zwischen den verschiedenen Definitionen der Linienbreite gibt. In dem gewählten Beispiel ist die *Peak-to-Peak*-Breite deutlich kleiner als der Quartilsabstand, der wiederum kleiner als die über die Momente von ϕ definierte Linienbreite ist.

Die numerischen Analysen des Abschnitts 5.2 zeigen außerdem am Beispiel des XX-Modells, dass die Kurven der dynamischen Suszeptibilität für mittlere Temperaturen sehr glatt und die *Finite-Size*-Korrekturen sehr klein sind, dass sie aber für tiefe Temperaturen sehr unruhig werden und selbst nach einer Glättung nur näherungsweise den glatten Kurven aus [67] entsprechen. Dies liegt an der deutlich kleineren Kettenlänge als in [67] und den damit verbundenen großen Energieabständen im diskreten Spektrum der endlichen Kette. Dennoch zeigen die numerischen Analysen dieses Abschnitts sowie diejenigen zum Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität aus Abschnitt 7.6, dass die *Finite-Size*-Korrekturen integrierter Größen im gesamten Temperaturbereich selbst für kleine Kettenlängen sehr klein sind.

Weiterhin wurden im Anhang die numerischen Daten zur dynamischen Suszeptibilität im massiven Bereich der XXZ-Kette für $\delta = 1$ und verschiedene Temperaturen mit dem analytischen Ergebnis des Ising-Limes verglichen und festgestellt, dass sich die Kurven insbesondere für hohe Temperaturen qualitativ ähnlich sind, dass sich das System also selbst für diesen kleinen Wert von δ schon Ising-artig verhält.

Ein ähnlicher Schluss wurde auch für verschwindende Temperatur aufgrund der Analysen zum Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität aus Kapitel 7 gezogen. Es konnte gezeigt werden, dass der Beitrag der Zwei-Spinonen-Anregungen des Systems im massiven Bereich der XXZ-Kette ohne Magnetfeld für $\delta > 1$ schon mehr als 96% der gesamten Spektralfunktion ausmacht, und dass anscheinend selbst für mittlere Temperaturen $T \approx J$ die Zwei-Spinonen-Anregungen die wesentliche Form der Spektralfunktion bestimmen. Im Ising-Limes $\delta \rightarrow \infty$ kann bei Temperatur $T = 0$ die Mikrowellenabsorption vollständig auf diese Anregungen zurückgeführt werden. Im isotropen Limes hingegen müssen vermutlich alle höheren Spinonen-Anregungen mitberücksichtigt werden. Auch weist der analytisch berechnete Zwei-Spinonen-Anteil für mittlere Anisotropien $0 < \delta \leq 3$ eine extrem asymmetrische Form auf, weshalb eine Definition der Peakposition über das Maximum der Kurve nicht sinnvoll erscheint.

Ein zentrales Ergebnis dieser Arbeit ist, dass zur Berechnung der ESR-Parameter der XXZ-Kette weder eine Störungsrechnung für kleine Anisotropien noch eine Annahme über die Linienform notwendig ist, sofern die ESR-Parameter über die Momente der Spektralfunktion definiert werden. Dies gilt für beliebige Temperaturen und Magnetfelder sowie den gesamten Parameterbereich der XXZ-Kette und beruht unter anderem auf der integrierbaren Struktur dieses Modells. Dass kurzreichweitige Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette exakt berechnet werden können, ermöglicht also eine Vorhersage für die Resonanzverschiebung und Linienbreite, die ohne Näherungen auskommt. Umgekehrt bedeutet dies aber auch, dass mit Hilfe der ESR-Spektroskopie bestimmte

Kombinationen von Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette experimentell zugänglich sind. Damit ist ein Zusammenhang der algebraisch-analytischen Methoden zur Bestimmung der kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen zur experimentellen Methode der ESR-Spektroskopie hergestellt worden. Weiterhin konnten anhand der exakten Resultate numerische Methoden und Näherungen, wie z. B. die Hochtemperaturentwicklung der Linienbreite aus Abschnitt 4.2.3, getestet und verbessert werden.

Diese Zusammenhänge zwischen den Methoden werfen neue Fragestellungen auf. Zum Beispiel gibt es quasi-eindimensionale Materialien, für die das XXZ-Modell keine gute Beschreibung liefert. Im effektiven Hamiltonoperator müssen dann neben dem $SU(2)$ -symmetrischen und dem anisotropen Austauschterm noch Zusatzterme berücksichtigt werden, und das Modell ist in der Regel nicht mehr integrierbar. Dennoch sollte eine Störungsentwicklung für kleine Zusatzterme möglich sein, weil ihre Koeffizienten durch kurzreichweitige Korrelationsfunktionen der integrierbaren XXZ-Kette ausgedrückt werden können. Der Vorteil, dass neben dem kleinen Zusatzterm auch ein anisotroper Austauschterm berücksichtigt wird, besteht darin, dass nicht um einen singulären Punkt entwickelt werden muss, weil die Spektralfunktion der XXZ-Kette für $\delta \neq 0$ eben nicht durch eine δ -Funktion gegeben ist. Beispiele für solche Zusatzterme sind die sogenannte Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung, Dipol-Dipol-Wechselwirkungen oder Wechselwirkungen zwischen übernächsten Nachbarn.

Speziell für eine Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung kann gezeigt werden, dass sie sich im Fall einer speziellen Richtung der Wechselwirkung auf eine XXZ-Kette abbilden lässt. Die absorbierte Intensität besteht dann aus einer Überlagerung zweier Verteilungen. Diese und insbesondere ihre Linienbreiten könnten mit Hilfe der Momentenmethode charakterisiert werden.

Ein weiterer interessanter Aspekt im Zusammenhang mit der ESR-Spektroskopie besteht in der Abhängigkeit der ESR-Parameter vom Winkel des äußeren statischen Magnetfeldes zur Achse der Anisotropie der XXZ-Kette. Für einen nichtverschwindenden Winkel ist das Modell nicht mehr integrierbar, und für größere Winkel scheint auch eine Störungsentwicklung nicht sinnvoll zu sein. Aber selbst wenn eine Störungsentwicklung nicht möglich sein sollte, können mit Hilfe numerischer Methoden, die an den exakten Resultaten des integrierbaren Modells getestet wurden, die ESR-Parameter mit entsprechender Genauigkeit numerisch bestimmt werden.

Eine konkrete Idee für weitere Analysen der Linienform der absorbierten Intensität der XXZ-Kette besteht in dem Formfaktorzugang für den kritischen Bereich des Modells. Außerdem könnte interessant sein, wie neuere Messmethoden, z. B. die resonante, inelastische Röntgenstreuung (RIXS) oder Myonenspinresonanz-Spektroskopie (μ SR), zur experimentellen Bestimmung spezieller kurzreichweitiger Korrelationsfunktionen genutzt werden können, und inwieweit diese experimentellen Resultate mit theoretischen Vorhersagen für die eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Kette verglichen werden können.

Anhang

A Spezialfälle

In diesem Teil des Anhangs werden drei spezielle Modelle sowie ein Grenzfall betrachtet, für die die dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} aus Gleichung (2.27d) und damit die absorbierte Intensität (2.27c) exakt berechnet werden können. Der zeitunabhängige Hamiltonoperator des Gesamtsystems sei durch $H = H_M + H_Z$ gegeben, wobei H_M den modellspezifischen Hamiltonoperator bezeichne. Die Kopplung der Spins an das in negative z -Richtung orientierte, homogene statische Magnetfeld der Stärke h werde durch den Zeeman-Term $H_Z = -hS^z$ beschrieben.

A.1 Paramagnet

Ein Paramagnet ist dadurch gekennzeichnet, dass die im System enthaltenen Spins nicht miteinander in Wechselwirkung stehen und somit $H_M = 0$ ist. Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems reduziert sich damit auf den Zeeman-Term $H = -hS^z$, und die Zeitentwicklung des Aufsteigers S^+ aus Gleichung (2.27a) lautet

$$S^+(t) = e^{it \text{ad}_H}(S^+) = e^{-iht \text{ad}_{S^z}}(S^+) = e^{-iht} S^+. \quad (\text{A.1})$$

Hierbei wurde benutzt, dass S^+ bezüglich der adjungierten Wirkung ad_{S^z} ein Eigenvektor mit Eigenwert 1 ist, d. h. $[S^z, S^+] = S^+$. Wird nun Gleichung (A.1) in Gleichung (2.27d) für die dynamische Suszeptibilität eingesetzt, so folgt wegen der Relation $[S^+, S^-] = 2S^z$ und der Darstellung $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-h)t} dt = 2\pi\delta(\omega-h)$ der δ -Funktion

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{2\pi}{L} \langle S^z \rangle_T \delta(\omega - h). \quad (\text{A.2})$$

Für die absorbierte Intensität (2.27c) folgt hiermit

$$I(\omega, h) = \pi h m(T, h) \delta(\omega - h). \quad (\text{A.3})$$

A.2 $SU(2)$ -symmetrisches Modell

Ein $SU(2)$ -symmetrisches Modell ist dadurch gekennzeichnet, dass der zugehörige modellspezifische Hamiltonoperator H_M dreihinvariant ist. Das bedeutet ferner, dass er mit den drei Komponenten des Gesamtspins kommutiert,

$$[H_M, S^\alpha] = 0, \quad \alpha = x, y, z. \quad (\text{A.4})$$

Ein Beispiel hierfür stellt das isotrope Heisenberg-Modell (3.1) dar. Wegen der $SU(2)$ -Invarianz (A.4) kommutiert sowohl der Zeeman-Term $-hS^z$ als auch der Aufsteiger $S^+ = S^x + iS^y$ mit H_M , und für die Zeitentwicklung (2.27a) von S^+ folgt

$$S^+(t) = e^{it \text{ad}_H}(S^+) = e^{it(\text{ad}_{H_M} + \text{ad}_{H_Z})}(S^+) = e^{-iht \text{ad}_{S^z}} \underbrace{e^{it \text{ad}_{H_M}}(S^+)}_{= S^+} = e^{-iht} S^+. \quad (\text{A.5})$$

Analog zum Paramagneten lautet demnach die absorbierte Intensität (2.27c)

$$I(\omega, h) = \pi h m(T, h) \delta(\omega - h), \quad (\text{A.6})$$

diesmal allerdings mit der z -Komponente der Magnetisierung $m(T, h) = \langle S^z \rangle_T / L$ des komplizierteren $SU(2)$ -symmetrischen Modells.

Für die Herleitung des Resultats (A.6) wurde keine Einschränkung an die Dimension des Systems gestellt. Insbesondere können für zwei- oder dreidimensionale Modelle die Austauschwechselwirkungen J_{ij} in (3.1) für verschiedene Raumrichtungen unterschiedlich sein. Wichtig ist nur, dass die Wechselwirkung im Spinraum isotrop ist, was durch das Skalarprodukt $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = \sum_{\alpha} s_i^{\alpha} s_j^{\alpha}$ unter der Summe sichergestellt wird.

Ein stark anisotropes Modell, für das die absorbierte Intensität exakt berechnet werden kann, stellt die Ising-Kette dar.

A.3 Eindimensionales Spin-1/2-Ising-Modell im longitudinalen Magnetfeld

Das eindimensionale Spin-1/2-Ising-Modell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung im longitudinalen Magnetfeld wird durch den Hamiltonoperator

$$H = H_I + H_Z = J \sum_{j=1}^L s_j^z s_{j+1}^z - h \sum_{j=1}^L s_j^z \quad (\text{A.7})$$

beschrieben [42] und im Folgenden auch kurz als Ising-Kette bezeichnet. Hierbei ist die Spinaustauschwechselwirkung J für alle Spins identisch und es werden periodische Randbedingungen angenommen, $s_{L+1}^z = s_1^z$. Der Hamiltonoperator (A.7) der Ising-Kette kann aus dem Hamiltonoperator (3.5) der XXZ-Kette durch die Skalierung $J \rightarrow J/\Delta$ und den Grenzübergang $\Delta \rightarrow \infty$ konstruiert werden.

Um die absorbierte Intensität (2.27c) zu berechnen, wird die Zeitentwicklung (2.27a) des Aufsteigers S^+ betrachtet. Wegen $[H_I, S^z] = 0$ vereinfacht sich diese zu

$$S^+(t) = e^{it(\text{ad}_{H_I} + \text{ad}_{H_Z})}(S^+) = e^{it \text{ad}_{H_I}} e^{-iht \text{ad}_{S^z}}(S^+) = e^{-iht} e^{it \text{ad}_{H_I}}(S^+). \quad (\text{A.8})$$

Zur Berechnung der Wirkung von $e^{it \text{ad}_{H_I}}$ auf S^+ wird zunächst mit vollständiger Induktion gezeigt, dass die n -fache Wirkung von ad_{H_I} auf s_j^+ den Ausdruck

$$\text{ad}_{H_I}^n(s_j^+) = J^n (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^n s_j^+ \quad (\text{A.9})$$

liefert. Der Induktionsanfang mit $n = 0$ ist trivial. Die Induktionsvoraussetzung ist durch Gleichung (A.9) gegeben und der Induktionsschluss von n auf $n + 1$ vollzieht sich wie folgt,

$$\begin{aligned} \text{ad}_{H_I}^{n+1}(s_j^+) &= [H_I, \text{ad}_{H_I}^n(s_j^+)] \stackrel{(\text{A.9})}{=} \left[J \sum_{k=1}^L s_k^z s_{k+1}^z, J^n (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^n s_j^+ \right] \\ &= J^{n+1} (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^n \underbrace{\left[s_{j-1}^z s_j^z + s_j^z s_{j+1}^z, s_j^+ \right]}_{= (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z) s_j^+} \\ &= J^{n+1} (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^{n+1} s_j^+, \quad \text{q. e. d.} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Der Ausdruck $(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^n$ kann weiter vereinfacht werden. Da der Term $(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)$ invariant unter der Multiplikation mit $(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^2$ ist,

$$(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^2 [s_{j-1}^z + s_{j+1}^z] = \left(\frac{1}{2} + 2s_{j-1}^z s_{j+1}^z \right) [s_{j-1}^z + s_{j+1}^z] = s_{j-1}^z + s_{j+1}^z, \quad (\text{A.11})$$

ergibt sich jeweils für ungerade und gerade Potenzen mit $n \geq 1$

$$(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^{2n-1} = \left[(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^2 \right]^{n-1} (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z) = s_{j-1}^z + s_{j+1}^z, \quad (\text{A.12a})$$

$$(s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^{2n} = (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^{2n-1} (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z) \stackrel{(\text{A.12a})}{=} \frac{1}{2} + 2s_{j-1}^z s_{j+1}^z. \quad (\text{A.12b})$$

Da also die n -fache Wirkung von ad_{H_I} auf s_j^+ einen von n unabhängigen Operator liefert, folgt

$$\begin{aligned} e^{it \text{ad}_{H_I}}(S^+) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} \text{ad}_{H_I}^n(S^+) \stackrel{(\text{A.9})}{=} S^+ + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(itJ)^n}{n!} \sum_{j=1}^L (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z)^n s_j^+ \\ &\stackrel{(\text{A.12})}{=} S^+ - A + \frac{A+B}{2} e^{iJt} + \frac{A-B}{2} e^{-iJt} \end{aligned} \quad (\text{A.13a})$$

mit

$$A = \sum_{j=1}^L \left(\frac{1}{2} + 2s_{j-1}^z s_{j+1}^z \right) s_j^+ \quad \text{und} \quad B = \sum_{j=1}^L (s_{j-1}^z + s_{j+1}^z) s_j^+. \quad (\text{A.13b})$$

Gleichung (A.13a) liefert zusammen mit Gleichung (A.8) die Zeitabhängigkeit des Aufsteigers S^+ ,

$$S^+(t) = e^{-iht} \left(S^+ - A + \frac{A+B}{2} e^{iJt} + \frac{A-B}{2} e^{-iJt} \right). \quad (\text{A.14})$$

Wird nun diese explizite Zeitabhängigkeit in Gleichung (2.27d) für die dynamische Suszeptibilität eingesetzt und die Integration über die Zeit ausgeführt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \chi''_{+-}(\omega, h) &= \frac{\pi}{L} \left\{ \langle [S^+ - A, S^-] \rangle_T \delta(\omega - h) + \frac{1}{2} \langle [A + B, S^-] \rangle_T \delta(\omega - h + J) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \langle [A - B, S^-] \rangle_T \delta(\omega - h - J) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Die Koeffizienten vor den δ -Funktionen können durch kurzreichweitige Korrelationsfunktionen der Ising-Kette ausgedrückt werden,

$$\frac{1}{2L} \langle [A, S^-] \rangle_T = \frac{1}{2} \langle s_1^z + 4s_1^z s_2^z s_3^z \rangle_T, \quad \frac{1}{2L} \langle [B, S^-] \rangle_T = 2 \langle s_1^z s_2^z \rangle_T, \quad (\text{A.16})$$

wobei sowohl die Definitionen (A.13b) als auch die Translationsinvarianz des Hamiltonoperators (A.7) benutzt wurden. Mit den Pauli-Matrizen $\sigma_j^z = 2s_j^z$ lautet die dynamische Suszeptibilität der Ising-Kette demnach

$$\begin{aligned} \chi''_{+-}(\omega, h) &= \frac{\pi}{4} \left\{ 2 \langle \sigma_1^z - \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T \delta(\omega - h) + \langle \sigma_1^z + 2\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T \delta(\omega - h + J) \right. \\ &\quad \left. + \langle \sigma_1^z - 2\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T \delta(\omega - h - J) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Mit Hilfe der 2×2 -Transfermatrix-Methode [7] für die Ising-Kette (A.7) können die Vorfaktoren der δ -Funktionen als explizite Funktionen von h und T geschrieben werden,

$$\langle \sigma_1^z \rangle_T = \frac{\text{sh}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\text{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{J/T}}}, \quad (\text{A.18a})$$

$$\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle_T = \langle \sigma_1^z \rangle_T^2 + \left(1 - \langle \sigma_1^z \rangle_T^2\right) f^{n-1}\left(\frac{h}{2T}, \frac{J}{T}\right), \quad (\text{A.18b})$$

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T = \langle \sigma_1^z \rangle_T \left(2 \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_T - \langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_T\right), \quad (\text{A.18c})$$

wobei die Funktion f durch

$$f(x, y) = \frac{\text{ch}(x) - \sqrt{\text{sh}^2(x) + e^y}}{\text{ch}(x) + \sqrt{\text{sh}^2(x) + e^y}} \quad (\text{A.19})$$

gegeben ist.

Die Drei-Peak-Struktur der dynamischen Suszeptibilität (A.17) lässt sich leicht interpretieren [21]. Die Eigenzustände des Hamiltonoperators H_I bestehen aus L -fachen Tensorprodukten lokaler Eigenzustände von s^z und sind somit gleichzeitig Eigenzustände des Gesamtspinoperators $S^z = \sum_{j=1}^L s_j^z$. Aus der Spektraldarstellung (2.31) der dynamischen Suszeptibilität wird ersichtlich, dass die absorbierte Energie $\omega = \Delta E = E_m - E_n$ mit dem Übergangsmatrixelement $\langle m | S^- | n \rangle$ verknüpft ist. Der Zustand $|m\rangle$ muss demnach einen um Eins kleineren Gesamtspin als der Zustand $|n\rangle$ besitzen. Folglich sind nur Übergänge möglich, bei denen ein nach oben gerichteter Spin umgedreht wird. Die vom System absorbierte Energie ΔE hängt dabei von den beiden Nachbarspins ab. Es gibt vier verschiedene Möglichkeiten,

$$\begin{aligned} \dots \uparrow\uparrow\uparrow \dots &\rightarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow \dots, & \Delta E = h - J, & \quad \dots \uparrow\uparrow\downarrow \dots &\rightarrow \dots \uparrow\downarrow\downarrow \dots, & \Delta E = h, \\ \dots \downarrow\downarrow\downarrow \dots &\rightarrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow \dots, & \Delta E = h + J, & \quad \dots \downarrow\uparrow\uparrow \dots &\rightarrow \dots \downarrow\downarrow\uparrow \dots, & \Delta E = h. \end{aligned}$$

Die beiden Übergänge in der linken Spalte beschreiben die Vernichtung bzw. Erzeugung eines Paares von sogenannten *domain walls* [73], die beiden in der rechten Spalte die Verschiebung einer *domain wall* nach rechts bzw. links.

Für niedrige Temperaturen $T \rightarrow 0$ wird das thermodynamische Verhalten des Systems durch den Grundzustand dominiert, wobei zwei Bereiche für das Magnetfeld h zu unterscheiden sind. Wenn h größer als das kritische Magnetfeld der Ising-Kette ist, $h > h_c = J$, dann ist der Grundzustand voll polarisiert, und es gilt für die Korrelationsfunktionen aus den Gleichungen (A.18a)–(A.18c)

$$\langle \sigma_1^z \rangle_{T=0} = \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{T=0} = \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_{T=0} = 1 \quad \text{für } h > J. \quad (\text{A.20})$$

Damit verschwinden in Gleichung (A.17) für die dynamische Suszeptibilität der erste und der letzte Vorfaktor vor den δ -Funktionen, und es folgt

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \pi \delta(\omega - h + J). \quad (\text{A.21})$$

Die zugehörige absorbierte Intensität besteht in diesem Grenzfall aus einem einzigen scharfen Peak. Dieses Ergebnis gilt nicht nur für die Ising-Kette, sondern auch für die allgemeinere XXZ-Kette (3.5) im vollpolarisierten Grundzustand bei Magnetfeldern $h > h_c = (1 + \Delta)J$, wobei in

(A.21) im Argument der δ -Funktion die Wechselwirkung J durch $J(\Delta - 1)$ ersetzt werden muss. Die Rechnung hierzu ist in Abschnitt A.4 zu finden.

Für Magnetfelder kleiner als das kritische Feld, $0 \leq h < h_c$, ist der Grundzustand zweifach entartet und durch die beiden Néel-Zustände $|+\rangle = |\cdots \uparrow \downarrow \uparrow \cdots\rangle$ und $|-\rangle = |\cdots \downarrow \uparrow \downarrow \cdots\rangle$ gegeben [105]. Für diesen zweifach entarteten Grundzustand berechnen sich thermische Erwartungswerte zu

$$\langle \cdot \rangle_{T=0} = \lim_{T \rightarrow 0} \langle \cdot \rangle_T = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H}(\cdot) \right\} = \frac{1}{2} \left(\langle + | (\cdot) | + \rangle + \langle - | (\cdot) | - \rangle \right), \quad (\text{A.22})$$

und es gilt

$$\langle \sigma_1^z \rangle_{T=0} = \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_{T=0} = 0 \quad \text{und} \quad \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{T=0} = -1 \quad \text{für} \quad 0 \leq h < h_c = J. \quad (\text{A.23})$$

Der Vorfaktor vor der ersten δ -Funktion in (A.17) verschwindet, und die beiden anderen berechnen sich zu $\pm 1/2$. Damit folgt für die dynamische Suszeptibilität und die absorbierte Intensität

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{\pi}{2} \left(\delta(\omega - h - J) - \delta(\omega - h + J) \right), \quad (\text{A.24a})$$

$$I(\omega, h) = \frac{\pi}{4} \left((J + h)\delta(\omega - h - J) + (J - h)\delta(\omega - h + J) \right). \quad (\text{A.24b})$$

Die absorbierte Intensität besteht in diesem Grenzfall aus zwei scharfen Peaks. Für $h = 0$ ist χ''_{+-} anti-symmetrisch in ω und der erste Summand in (A.24a) stimmt mit dem Ising-Limes des Zwei-Spinonen-Anteils der dynamischen Suszeptibilität aus Abschnitt 7.3 überein.

Bei hohen Temperaturen $T \rightarrow \infty$ verschwindet die dynamische Suszeptibilität identisch, was in Anhang B.5 für den allgemeinen Fall (2.27d) gezeigt wird. Für den Spezialfall der Ising-Kette verschwinden alle drei Vorfaktoren der δ -Funktionen in (A.17) mit der Ordnung $1/T$. Der Limes $T \rightarrow \infty$ in den drei Korrelationsfunktionen (A.18a)–(A.18c) führt nach einer Skalierung mit T jeweils auf

$$\lim_{T \rightarrow \infty} T \langle \sigma_1^z \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T \text{sh}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\text{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{J/T}}} = \frac{h}{2}, \quad (\text{A.25a})$$

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} T \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_T &= \lim_{T \rightarrow \infty} T \left(\langle \sigma_1^z \rangle_T^2 + \left(1 - \langle \sigma_1^z \rangle_T^2\right) f\left(\frac{h}{2T}, \frac{J}{T}\right) \right) = \lim_{T \rightarrow \infty} T f\left(\frac{h}{2T}, \frac{J}{T}\right) \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} T \frac{\text{ch}(h/2T) - \sqrt{\text{sh}^2(h/2T) + e^{J/T}}}{\text{ch}(h/2T) + \sqrt{\text{sh}^2(h/2T) + e^{J/T}}} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} T \frac{1 - \sqrt{1 + J/T}}{2} = -\frac{J}{4}, \end{aligned} \quad (\text{A.25b})$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} T \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} T \langle \sigma_1^z \rangle_T \left(2 \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_T - \langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_T \right) = 0. \quad (\text{A.25c})$$

Werden diese Resultate in (A.17) eingesetzt und ein zusätzlicher Normierungsfaktor $2/\omega\pi$ be-

rücksichtigt (siehe hierzu Anhang B.5), so folgt für die Vorfaktoren der δ -Funktionen

$$\frac{\pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{h\pi} 2 \langle \sigma_1^z - \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T = \frac{1}{2}, \quad (\text{A.26a})$$

$$\frac{\pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{(h - J)\pi} \langle \sigma_1^z + 2\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T = \frac{1}{4}, \quad (\text{A.26b})$$

$$\frac{\pi}{4} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{(h + J)\pi} \langle \sigma_1^z - 2\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \rangle_T = \frac{1}{4}, \quad (\text{A.26c})$$

und damit schließlich

$$\phi_I(\omega - h) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{\omega\pi} \chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{4} \delta(\omega - h - J) + \frac{1}{2} \delta(\omega - h) + \frac{1}{4} \delta(\omega - h + J). \quad (\text{A.27})$$

Im Ising-Limes $\Delta \rightarrow \infty$ der XXZ-Kette (3.5) bewirkt der Absteiger S^- in den Matrixelementen $\langle m | S^- | n \rangle$ der Spektraldarstellung (2.31) Übergänge zwischen Eigenzuständen. Dies ist für endliche Werte des Anisotropieparameters im massiven Bereich $\Delta > 1$ nicht mehr der Fall. Die Konsequenz hieraus ist, dass sich die drei δ -Peaks in (A.17) bzw. (A.27) verbreitern, was sich auch durch das Einsetzen der Wechselwirkung zwischen den sogenannten Spinonenzuständen erklären lässt (siehe Kapitel 7). Die Drei-Peak-Struktur (A.27) für hohe Temperaturen ist charakteristisch für den massiven Bereich, was zu den numerischen Rechnungen aus Abbildung A.1 und vorherigen numerischen Arbeiten von Miyashita et al. passt [85].

Das linke Diagramm der Abbildung A.1 zeigt die mit dem Faktor $2TJ/\omega\pi$ skalierte dynamische Suszeptibilität aus Gleichung (A.17) als Funktion der Frequenz ω/J für ein Magnetfeld der Stärke $h = 2J > h_c$ und verschiedene Temperaturen. Zur besseren Darstellung wurden die δ -Peaks mit einer Cauchy-Lorentz-Verteilung

$$\mathcal{L}(\omega) = \frac{J}{\pi} \frac{\epsilon}{\omega^2 + \epsilon^2} \quad (\text{A.28})$$

gefaltet. Der Übergang von der Ein-Peak-Struktur aus Gleichung (A.21) für tiefe Temperaturen ($T = 0.1J$) zur Drei-Peak-Struktur der Funktion ϕ_I für hohe Temperaturen ($T \geq 5J$) ist gut zu erkennen. Die beiden äußeren Peaks von ϕ_I bei $\omega = h \pm J$ sind für sehr hohe Temperaturen ($T = 50J$) halb so hoch wie der zentrale Peak bei $\omega = h$.

Dem gegenübergestellt sind in den rechten Diagrammen der Abbildung A.1 numerische Berechnungen der Funktion $2T\chi''_{+-}(\omega, h)/\omega\pi$ als Funktion von ω/J für einen Anisotropieparameter $\Delta = 2$ und gleiche Parameter h und T . Die Ein- und Drei-Peak-Struktur für tiefe und hohe Temperaturen sind auch dort gut zu erkennen. Der zentrale Peak bei $\omega = h$ für hohe Temperaturen ($T \geq 5J$) ist hier allerdings deutlich höher als die doppelte Höhe der beiden äußeren Peaks bei $\omega = h \pm J$. Letztere sind für $\Delta = 1.25$ in Abbildung 6.2 gar nicht mehr zu erkennen. Am isotropen Punkt $\Delta = 1$ gibt es selbst für hohe Temperaturen gemäß Gleichung (A.6) nur noch einen einzigen Peak bei $\omega = h$. Für Werte des Anisotropieparameters von $\Delta \geq 2$ verhält sich das System also Ising-artig, wobei die relative Höhe des zentralen Peaks andeutet, dass in dem Bereich $1.25 \leq \Delta \leq 2$ ein Übergang zur Ein-Peak-Struktur stattfindet, die für den isotropen Punkt charakteristisch ist. Die Ergebnisse der Untersuchung des Zwei-Spinonen-Anteils der dynamischen Suszeptibilität aus Kapitel 7 bestätigen dieses Verhalten auch für tiefe Temperaturen und verschwindendes Magnetfeld ($T = h = 0$).

In der Arbeit [21] wurde in Abbildung 5 die dynamische Suszeptibilität (A.17) als Funktion des Magnetfeldes dargestellt und gezeigt, dass diese nicht nur ein qualitatives Bild für die dynamische

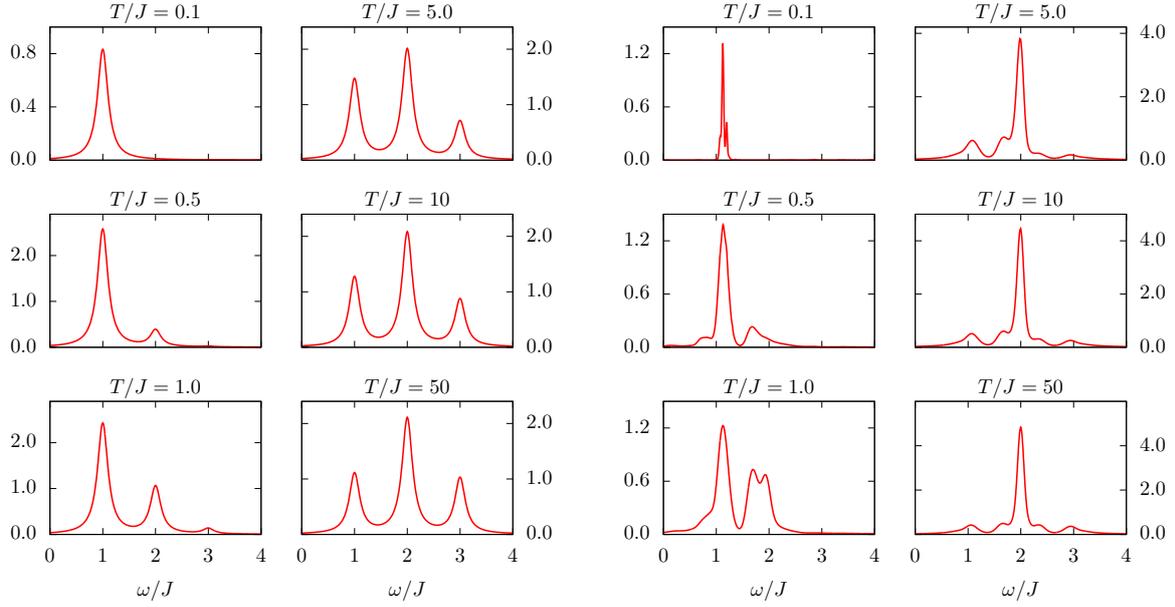


Abb. A.1: Mit $2TJ/\omega\pi$ skalierte dynamische Suszeptibilität χ''_{+-} aus Gleichung (A.17) als Funktion der Frequenz für $h = 2J$ und verschiedenen Temperaturen $0.1J \leq T \leq 50J$ (links). Die δ -Peaks wurden mit der Cauchy-Lorentz-Verteilung (A.28) mit dem Parameter $\epsilon = 0.12J$ gefaltet. Die Diagramme rechts zeigen numerische Berechnungen dieser Funktion für gleiche Werte von h und T , für einen Anisotropieparameter von $\Delta = 2$ und eine Kette der Länge $L = 24$.

Suszeptibilität mit endlicher Anisotropie liefert, sondern dass sie mit den numerisch berechneten Drei-Peak-Strukturen für $\Delta = 2$ aus Abbildung 8 in [85] sowohl in den relativen als auch den absoluten Höhen der Peaks gut übereinstimmt.

A.4 Dynamische Suszeptibilität im vollpolarisierten Grundzustand des XXZ-Modells

Im ferromagnetisch massiven Bereich der XXZ-Kette (3.5) ist der energetisch günstigste Zustand derjenige, in dem alle Spins nach oben ausgerichtet sind. Dieser vollpolarisierte Grundzustand des Spinsystems wird im Folgenden mit $|VP\rangle$ bezeichnet. Da dieser nicht entartet ist, sind thermische Erwartungswerte im Grenzfall verschwindender Temperatur allein durch diesen Grundzustand bestimmt,

$$\langle \cdot \rangle_{T=0} = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} A \right\} = \langle VP | (\cdot) | VP \rangle . \quad (\text{A.29})$$

Um die dynamische Suszeptibilität (2.27d) in diesem Grenzfall zu erhalten, wird der Erwartungswert $\langle VP | [S^+(t), S^-] | VP \rangle$ explizit berechnet. Wegen $[H_{XXZ}, S^z] = 0$ kann die Zeitentwicklung bezüglich des Zeeman-Terms abgespalten werden,

$$\langle VP | [S^+(t), S^-] | VP \rangle = e^{-iht} \langle VP | e^{itH_{XXZ}} S^+ e^{-itH_{XXZ}} S^- | VP \rangle . \quad (\text{A.30})$$

Hierbei wurde benutzt, dass der zweite Term des Kommutators wegen $\langle \text{VP} | S^- = 0$ verschwindet. Wegen

$$\sum_{j=1}^L s_j^+ s_{j+1}^- S^- |\text{VP}\rangle = \sum_{j=1}^L s_j^- s_{j+1}^+ S^- |\text{VP}\rangle = S^- |\text{VP}\rangle, \quad (\text{A.31a})$$

$$\sum_{j=1}^L s_j^z s_{j+1}^z S^- |\text{VP}\rangle = \frac{L-4}{4} S^- |\text{VP}\rangle \quad (\text{A.31b})$$

ist der Zustand $S^- |\text{VP}\rangle$ ein Eigenzustand von H_{XXZ} , und es folgt

$$S^+ e^{-itH_{XXZ}} S^- |\text{VP}\rangle = S^+ e^{-itJ(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+\Delta\frac{L-4}{4})} S^- |\text{VP}\rangle = L e^{-itJL\Delta/4} e^{itJ(\Delta-1)} |\text{VP}\rangle. \quad (\text{A.32})$$

Zusammen mit Gleichung (A.30) und den Relationen

$$H_{XXZ} |\text{VP}\rangle = JL\Delta/4 |\text{VP}\rangle, \quad \langle \text{VP} | \text{VP} \rangle = 1 \quad (\text{A.33})$$

ergibt sich schließlich

$$\langle \text{VP} | [S^+(t), S^-] | \text{VP} \rangle = e^{-iht} e^{itJ(\Delta-1)}. \quad (\text{A.34})$$

Damit berechnet sich die dynamische Suszeptibilität (2.27d) für die XXZ-Kette mit $T = 0$ und $h > h_c = J(1 + \Delta)$ nach Ausführen der Integration über die Zeit zu

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \pi \delta(\omega - h + J(\Delta - 1)). \quad (\text{A.35})$$

Wird J durch Δ skaliert und der Grenzübergang $\Delta \rightarrow \infty$ durchgeführt, so ergibt sich aus Gleichung (A.35) die dynamische Suszeptibilität (A.21) der Ising-Kette für den Grenzfall $T = 0$ und $h > h_c = J$.

B Technische Details zur Momentenmethode

In diesem Teil des Anhangs befinden sich technische Details zu Kapitel 4, die im Wesentlichen die Berechnung der Momente betreffen.

B.1 Momente für allgemeine Modelle

Zur Herleitung der Gleichungen (4.7) sind folgende zwei Relationen nützlich,

$$\text{ad}_A([B, C]) = [\text{ad}_A(B), C] + [B, \text{ad}_A(C)] , \quad (\text{B.1})$$

$$\langle [H, A] \rangle_T = 0 \quad \text{für} \quad \langle \cdot \rangle_T = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} (\cdot) \right\} . \quad (\text{B.2})$$

Die erste gilt für beliebige Operatoren A , B und C und besagt, dass für die adjungierte Wirkung ad_A eine Produktregel ähnlich zu derjenigen der Ableitung gilt. Sie ist äquivalent zur Jacobi-Identität des Kommutators. Die zweite gilt aufgrund der Invarianz der Spur für alle Operatoren A und Hamiltonoperatoren H .

Gleichung (4.7a) folgt aus $[S^+, S^-] = 2S^z$. Um Gleichung (4.7b) herzuleiten, wird zunächst in (4.6) die Produktregel der Ableitung angewendet und dann die Bewegungsgleichung für den Aufsteiger S^+ , $i\partial_t S^+(t) = -[H, S^+(t)]$ mit $H = H_M - hS^z$, sowie $[S^z, S^+] = S^+$ eingesetzt. Schließlich werden die Relationen (B.1) und (B.2) für $A = S^-$, $B = H' = H_M/J$ und $C = S^+$ benutzt, um den Kommutator mit H' von S^+ auf S^- umzuschreiben,

$$\begin{aligned} m_1 &= -\frac{J^{-1}}{2L} (h \langle [S^+, S^-] \rangle_T + \langle [[H, S^+], S^-] \rangle_T) \\ &= -\frac{1}{2L} \left(\frac{h}{J} \langle [S^+, S^-] \rangle_T + \frac{1}{J} \langle [[H_M - hS^z, S^+], S^-] \rangle_T \right) \\ &= \frac{1}{2L} \langle [[S^+, H'], S^-] \rangle_T = \frac{1}{2L} \langle [S^+, [H', S^-]] \rangle_T . \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Die Rechnungen für m_2 und m_3 verlaufen analog,

$$\begin{aligned} 2Lm_2 &= J^{-2} (h^2 \langle [S^+, S^-] \rangle_T + 2h \langle [[H, S^+], S^-] \rangle_T + \langle [[H, [H, S^+]], S^-] \rangle_T) \\ &= \frac{h}{J} \langle [[H', S^+], S^-] \rangle_T + \langle [[H', [H', S^+]], S^-] \rangle_T - \frac{h}{J} \langle [[S^z, [H', S^+]], S^-] \rangle_T \\ &= \langle [[H', S^-], [H', S^+]] \rangle_T + \underbrace{\langle [H', [[H', S^+], S^-]] \rangle_T - \frac{h}{J} \langle [S^z, [[H', S^+], S^-]] \rangle_T}_{\sim \langle [H, [[H', S^+], S^-]] \rangle_T = 0} \\ &= \langle [[S^+, H'], [H', S^-]] \rangle_T , \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$2Lm_3 = -J^{-3} (h^3 \langle [S^+, S^-] \rangle_T + 3h^2 \langle [[H, S^+], S^-] \rangle_T$$

$$\begin{aligned}
& + 3h \langle [[H, [H, S^+]], S^-] \rangle_T + \langle [\text{ad}_H^3(S^+), S^-] \rangle_T \\
& = \frac{3h^2}{J^2} \langle [[S^z, \text{ad}_{H'}(S^+)], S^-] \rangle_T - \frac{3h}{J} \langle [\text{ad}_{H'}^2(S^+), S^-] \rangle_T - \langle [\text{ad}_{H'}^3(S^+), S^-] \rangle_T \\
& \quad - \frac{h^2}{J^2} \langle [(\text{ad}_{H'} + \text{ad}_{S^z} \circ \text{ad}_{H'} + \text{ad}_{S^z} \circ \text{ad}_{S^z} \circ \text{ad}_{H'})(S^+), S^-] \rangle_T \\
& \quad + \frac{h}{J} \langle [(\text{ad}_{H'} \circ \text{ad}_{H'} + \text{ad}_{H'} \circ \text{ad}_{S^z} \circ \text{ad}_{H'} + \text{ad}_{S^z} \circ \text{ad}_{H'} \circ \text{ad}_{H'})(S^+), S^-] \rangle_T \\
& = - \langle [\text{ad}_{H'}(S^+), \text{ad}_{H'}^2(S^-)] \rangle_T + \frac{h}{J} \langle [\text{ad}_{H'}(S^+), \text{ad}_{[S^z, H']} (S^-)] \rangle_T \\
& = \langle [[S^+, H'], [H', [H', S^-]]] \rangle_T - \frac{h}{J} \langle [[S^+, H'], [[S^z, H'], S^-]] \rangle_T. \tag{B.5}
\end{aligned}$$

Hierbei wurden im vorletzten Schritt die Relationen (B.1) und (B.2) mehrmals hintereinander benutzt. Division durch $2L$ liefert die Formeln (4.7c) und (4.7d) des Haupttextes.

B.2 Momente für die XXZ-Kette

Um die Gleichungen (4.11) zu erhalten, wird der Hamiltonoperator H' aus Gleichung (4.10) in die Gleichungen (4.7) eingesetzt. Obwohl für die XXZ-Kette $[H', S^z] = 0$ gilt, wird nicht Gleichung (4.9), sondern (4.7) benutzt, weil dies zu kompakteren Ausdrücken für die Momente $m_{n \leq 3}$ führt.

In den Gleichungen für die Momente taucht der Kommutator $[H', S^-]$ auf, weshalb dieser zunächst vereinfacht wird. Es gilt

$$\begin{aligned}
[H', S^-] & = [H_{SU(2)} + H_\delta, S^-] = [H_\delta, S^-] = \delta \sum_{j,k=1}^L [s_j^z s_{j+1}^z, s_k^-] \\
& = \delta \sum_{j=1}^L [s_j^z s_{j+1}^z, s_j^- + s_{j+1}^-] = -\delta \sum_{j=1}^L (s_j^- s_{j+1}^z + s_j^z s_{j+1}^-). \tag{B.6}
\end{aligned}$$

Hierbei wurden die Relationen $[s_j^\alpha, s_k^\beta] = 0$ für $j \neq k$ und $[s_j^z, s_j^-] = -s_j^-$ ausgenutzt. Zur einfacheren Schreibweise wird folgende Notation eingeführt,

$$(\alpha, \beta, \dots) = \sum_{j=1}^L s_j^\alpha s_{j+1}^\beta \dots \quad \text{für } \alpha, \beta, \dots \in \{1, z, +, -\}. \tag{B.7}$$

Eine Eins in den runden Klammern bedeutet, dass an der entsprechenden Stelle eine Identität steht. Zum Beispiel bedeutet

$$(+, 1, -) = \sum_{j=1}^L s_j^+ s_{j+2}^- = \sum_{j=1}^L s_{j-1}^+ s_{j+1}^-. \tag{B.8}$$

Wegen der periodischen Randbedingungen ist der Hamiltonoperator (4.10) translationsinvariant und obige Notation vereinfacht sich insofern, als führende und nachfolgende Einsen innerhalb der runden Klammern weggelassen werden können, $(1, \alpha, \beta) = (\alpha, \beta, 1) = (\alpha, \beta)$. Relation (B.6) liest sich damit wie folgt,

$$[H', S^-] = \delta [(z, z), (-)] = -\delta ((-, z) + (z, -)). \tag{B.9}$$

Außerdem wird noch die Kurznotation

$$\langle \alpha, \beta, \dots \rangle = \frac{1}{L} \langle (\alpha, \beta, \dots) \rangle_T = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \langle s_j^\alpha s_{j+1}^\beta \dots \rangle_T = \langle s_1^\alpha s_2^\beta \dots \rangle_T \quad (\text{B.10})$$

eingeführt, wobei im letzten Schritt die Translationsinvarianz ausgenutzt wurde. Eine 1 anstatt eines Symbols $\alpha, \beta \in \{z, +, -\}$ meint hierbei wieder, dass ein Gitterplatzindex übersprungen wird. Um die Ausdrücke für die Momente m_1, m_2 und vor allem m_3 in einer möglichst kompakten Form zu schreiben, wird zusätzlich zur Translationsinvarianz die Inversionssymmetrie ausgenutzt, d. h. $\langle \alpha, \beta \rangle = \langle \beta, \alpha \rangle$, $\langle \alpha, \beta, \gamma \rangle = \langle \gamma, \beta, \alpha \rangle$ und so weiter.

- Für das nullte Moment m_0 gilt mit dieser Notation

$$m_0 = \frac{1}{2L} \langle [S^+, S^-] \rangle_T = \frac{1}{2L} \underbrace{\langle [(+), (-)] \rangle_T}_{= 2\langle z \rangle} = \langle z \rangle = \langle s_1^z \rangle_T \quad (\text{B.11})$$

- Das erste Moment kann mit Gleichung (B.6) geschrieben werden als

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{1}{2L} \langle [S^+, [H', S^-]] \rangle_T = -\frac{\delta}{2L} \langle [(+), (-, z) + (z, -)] \rangle_T \\ &= -\frac{\delta}{2L} \langle 2\langle z, z \rangle - \langle -, + \rangle - \langle +, - \rangle + 2\langle z, z \rangle \rangle_T \\ &= -\frac{\delta}{2} \left(4\langle z, z \rangle - \langle -, + \rangle - \langle +, - \rangle \right) \\ &= \delta \left(\langle +, - \rangle - 2\langle z, z \rangle \right), \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

wobei im letzten Schritt die Inversionssymmetrie $\langle -, + \rangle = \langle +, - \rangle$ benutzt wurde.

Für m_2 und m_3 müssen mehrere Kommutatoren mit H' berechnet werden. Hierfür ist es zweckmäßig, Rechenregeln für Kommutatoren zwischen runden Klammern anzugeben. Es gilt

$$\begin{aligned} [(\alpha, \beta), (\gamma, \delta, \epsilon, \dots)] &= (\alpha, [\beta, \gamma], \delta, \dots) + ([(\alpha, \beta), (\gamma, \delta)]', \epsilon, \dots) + (\gamma, [(\alpha, \beta), (\delta, \epsilon)]', \dots) + \dots \\ \text{mit } [(\alpha, \beta), (\gamma, \delta)]' &= ([\alpha, \gamma], \beta \star \delta) + (\alpha \star \gamma, [\beta, \delta]) - ([\alpha, \gamma], [\beta, \delta]), \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

wobei mit der Multiplikation \star und dem Kommutator $[\cdot, \cdot]$ innerhalb der runden Klammern die gewöhnlichen Verknüpfungen zwischen den zugehörigen lokalen Gitterplatzoperatoren gemeint sind. Beispiele hierfür sind

$$\begin{aligned} [(z, -), (+, z)]' &= ([z, +], \underbrace{- \star z}_{= \frac{1}{2}(-)}) + (\underbrace{z \star +}_{= \frac{1}{2}(+)}, [-, z]) - ([z, +], [-, z]) = 0 \\ \Rightarrow 0 &= [(z, -), (+, z)]' = [(-, z), (z, +)]' = [(z, +), (-, z)]' = [(+, z), (z, -)]', \end{aligned} \quad (\text{B.14a})$$

$$\begin{aligned} [(+, z), (-, z)]' &= -[(-, z), (+, z)]' = ([+, -], z \star z) = (2z, \frac{1}{4}) = \frac{1}{2}(z, 1) \\ \Rightarrow [(z, +), (z, -)]' &= -[(z, -), (z, +)]' = \frac{1}{2}(1, z) \end{aligned} \quad (\text{B.14b})$$

und weiter

$$[(+, z), (z, z)]' = -\frac{1}{4}(+, 1), \quad (\text{B.14c})$$

$$[(+, z), (-, +)]' = (2z, \frac{1}{2}+) + \underbrace{(+ \star -, +)} - (2z, +) = \frac{1}{2}(1, +), \quad (\text{B.14d})$$

$$[(+, z), (-, -)]' = -\frac{1}{2}(1, -), \quad = \frac{1}{2}+z \quad (\text{B.14e})$$

$$[(+, z), (+, -)]' = 0. \quad (\text{B.14f})$$

Die Abbildung $\varphi : (\alpha, \beta) \mapsto [H', (\alpha, \beta)]'$ mit $H' = \frac{1}{2}(+, -) + \frac{1}{2}(-, +) + \Delta(z, z)$ lautet für alle Kombinationen $\alpha, \beta \in \{1, z, +, -\}$

$$\begin{array}{llll} \varphi(1,1) = 0 & \varphi(1,z) = \frac{1}{2}(+,-) - \frac{1}{2}(-,+ & \varphi(1,+) = \Delta(z,+)-(+,z) & \varphi(1,-) = (-,z)-\Delta(z,-) \\ \varphi(z,1) = \frac{1}{2}(-,+)-\frac{1}{2}(+,-) & \varphi(z,z) = 0 & \varphi(z,+) = \frac{\Delta}{4}(1,+)-\frac{1}{4}(+,1) & \varphi(z,-) = \frac{1}{4}(-,1)-\frac{\Delta}{4}(1,-) \\ \varphi(+,1) = \Delta(+,z)-(+,z) & \varphi(+,z) = \frac{\Delta}{4}(+,1)-\frac{1}{4}(1,+ & \varphi(+,+) = 0 & \varphi(+,-) = \frac{1}{2}(1,z)-\frac{1}{2}(z,1) \\ \varphi(-,1) = (z,-)-\Delta(-,z) & \varphi(-,z) = \frac{1}{4}(1,-)-\frac{\Delta}{4}(-,1) & \varphi(-,+) = \frac{1}{2}(z,1)-\frac{1}{2}(1,z) & \varphi(-,-) = 0 \end{array} \quad (\text{B.15})$$

und wird für spätere Zwecke benötigt.

- Das zweite Moment lautet mit diesen Rechenregeln unter zweifacher Benutzung von Gleichung (B.6)

$$\begin{aligned} m_2 &= \frac{1}{2L} \langle [[S^+, H'], [H', S^-]] \rangle_T = \frac{\delta^2}{2L} \langle [(+, z) + (z, +), (-, z) + (z, -)] \rangle_T \\ &= \frac{\delta^2}{2L} \left\langle - (+, -, z) + \underbrace{[(+, z), (-, z)]'}_{= \frac{1}{2}(z,1)} - (-, +, z) + \underbrace{[(+, z), (z, -)]'}_{= 0} + 2(z, z, z) \right. \\ &\quad \left. + 2(z, z, z) + \underbrace{[(z, +), (-, z)]'}_{= 0} - (z, +, -) + \underbrace{[(z, +), (z, -)]'}_{= \frac{1}{2}(1,z)} - (z, -, +) \right\rangle_T \\ &= \frac{\delta^2}{2} \left(4 \langle z, z, z \rangle + \langle z \rangle - \langle +, -, z \rangle - \langle -, +, z \rangle - \langle z, +, - \rangle - \langle z, -, + \rangle \right) \\ &= \frac{\delta^2}{2} \left(\langle z \rangle + 4 \langle z, z, z \rangle - 4 \langle z, +, - \rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Die Vereinfachung im letzten Schritt beruht auf Gleichung (B.2) mit $A = (+, -) + (-, +)$. Wegen $[(z, z), (+, -)]' = 0$ und der Inversionssymmetrie folgt nämlich

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{L} \langle [H', A] \rangle_T = \frac{1}{L} \langle [(z, z), (+, -) + (-, +)] \rangle_T \\ &= \langle z, +, - \rangle - \langle +, -, z \rangle - \langle z, -, + \rangle + \langle -, +, z \rangle = 2 \langle z, +, - \rangle - 2 \langle z, -, + \rangle \\ &\Rightarrow \langle z, +, - \rangle = \langle z, -, + \rangle = \langle +, -, z \rangle = \langle -, +, z \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

- Das dritte Moment lautet

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{1}{2L} \langle [[S^+, H'], [H', [H', S^-]]] \rangle_T \\ &= \frac{\delta^2}{2L} \langle [(+, z) + (z, +), [\frac{1}{2}(+, -) + \frac{1}{2}(-, +) + \Delta(z, z), (-, z) + (z, -)]] \rangle_T \\ &= \frac{\delta^2}{L} \langle [(+, z), [\frac{1}{2}(+, -) + \frac{1}{2}(-, +) + \Delta(z, z), (-, z) + (z, -)]] \rangle_T, \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

weil der zweite Term im äußeren Kommutator wegen der Inversionssymmetrie identisch zum ersten ist. Der innere Kommutator liefert gemäß der Regel (B.13) zum einen Dreier-Terme der Form (α, β, γ) und zum anderen den Term

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2}(+, -) + \frac{1}{2}(-, +) + \Delta(z, z), (-, z) + (z, -) \right]' = [H', (-, z) + (z, -)]' \\ & = \varphi(-, z) + \varphi(z, -) = \frac{1}{4}(1, -) - \frac{\Delta}{4}(-, 1) + \frac{1}{4}(-, 1) - \frac{\Delta}{4}(1, -) = -\frac{\delta}{2}(-) \\ \rightarrow & \frac{\delta^2}{L} \langle [(+, z), -\frac{\delta}{2}(-)] \rangle_T = \frac{\delta^2}{4} (2\delta \langle +, - \rangle - 4\delta \langle z, z \rangle). \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Die Dreier-Terme lauten

$$\begin{aligned} T_3 &= \left[\frac{1}{2}(+, -) + \frac{1}{2}(-, +) + \Delta(z, z), (-, z) + (z, -) \right] - \varphi(-, z) - \varphi(z, -) \\ &= \frac{1}{2}(+, -, -) - (-, +, -) + \frac{1}{2}(-, -, +) + (z, z, -) + (-, z, z) - 2\Delta(z, -, z). \end{aligned}$$

Der Kommutator mit $(+, z)$ wiederum liefert gemäß der Regel (B.13) Vierer-Terme und Terme mit $[\cdot, \cdot]'$. Letztere ergeben sich wegen der Gleichungen (B.14) zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \langle [(+, z), (+, -, -)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (+, -)]', - \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (+, [(+, z), (-, -)]' \rangle_T \\ &= -\frac{1}{2} \langle +, 1, - \rangle, \\ \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, +, -)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, +)]', - \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (-, [(+, z), (+, -)]' \rangle_T \\ &= \frac{1}{2} \langle +, - \rangle, \\ \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, -, +)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, -)]', + \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (-, [(+, z), (-, +)]' \rangle_T \\ &= -\frac{1}{2} \langle -, + \rangle + \frac{1}{2} \langle -, 1, + \rangle, \\ \frac{1}{L} \langle [(+, z), (z, z, -)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (z, z)]', - \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (z, [(+, z), (z, -)]' \rangle_T \\ &= -\frac{1}{4} \langle +, 1, - \rangle, \\ \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, z, z)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (-, z)]', z \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (-, [(+, z), (z, z)]' \rangle_T \\ &= \frac{1}{2} \langle z, 1, z \rangle - \frac{1}{4} \langle +, - \rangle, \\ \frac{1}{L} \langle [(+, z), (z, -, z)]' \rangle_T &= \frac{1}{L} \langle [(+, z), (z, -)]', z \rangle_T + \frac{1}{L} \langle (z, [(+, z), (-, z)]' \rangle_T \\ &= \frac{1}{2} \langle z, z \rangle, \end{aligned}$$

zusammenfassend also

$$\frac{\delta^2}{4} (2 \langle z, 1, z \rangle - 4 \langle z, z \rangle - 4 \langle +, - \rangle - \langle +, 1, - \rangle - 4\delta \langle z, z \rangle). \quad (\text{B.20})$$

Die Vierer-Terme lauten wegen der Inversionssymmetrie und mit $\Delta = 1 + \delta$

$$\begin{aligned} & \frac{\delta^2}{2L} \left\langle (+, +, -, -) + 2(+, -, +, -) - (+, -, -, +) - 4(-, +, z, z) \right. \\ & \quad \left. + 4(z, z, z, z) - 2(-, z, +, z) + 4\Delta(z, -, +, z) \right\rangle_T \\ &= \frac{\delta^2}{4} \left(2 \langle +, +, -, - \rangle + 4 \langle +, -, +, - \rangle - 2 \langle +, -, -, + \rangle \right. \\ & \quad - 8 \langle z, z, +, - \rangle - 4 \langle z, +, z, - \rangle + 8 \langle z, +, -, z \rangle \\ & \quad \left. + 8 \langle z, z, z, z \rangle + 8\delta \langle z, -, +, z \rangle \right). \quad (\text{B.21}) \end{aligned}$$

Werden nun alle Terme (B.19)–(B.21) zusammengefasst, so folgt schließlich für das dritte Moment

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{\delta^2}{4} \left(2 \langle +, +, -, - \rangle + 4 \langle +, -, +, - \rangle - 2 \langle +, -, -, + \rangle \right. \\ & \quad - 8 \langle z, z, +, - \rangle - 4 \langle z, +, z, - \rangle + 8 \langle z, +, -, z \rangle - 4 \langle +, - \rangle - \langle +, 1, - \rangle \\ & \quad \left. + 8 \langle z, z, z, z \rangle + 2 \langle z, 1, z \rangle - 4 \langle z, z \rangle + \delta (8 \langle z, +, -, z \rangle + 2 \langle +, - \rangle - 8 \langle z, z \rangle) \right). \quad (\text{B.22}) \end{aligned}$$

Zusammen mit der Kurznotation (B.10) sind damit die Formeln (4.11) des Haupttextes für die vier Momente $m_{n \leq 3}$ bewiesen.

- Es gibt noch andere Darstellungen der Momente m_n , z.B. wenn alle Kommutatoren mit H' nur nach rechts wirken und die über die Gleichungen (B.15) definierte Abbildung φ konsequent angewendet wird. Dies liefert beispielsweise für m_3 den Ausdruck [63]

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{\delta}{2} \left[\delta \langle +, +, -, - \rangle + 2(3 + 2\delta) \langle +, -, +, - \rangle - 3(1 + \delta) \langle +, -, -, + \rangle - 3 \langle -, +, +, - \rangle \right. \\ & \quad - 12(1 + \delta) \langle z, +, -, z \rangle + (6 - 2\delta) \langle z, +, z, - \rangle + (6 + 4\delta) \langle +, z, -, z \rangle \\ & \quad + 4\delta \langle +, -, z, z \rangle - 8\delta \langle -, +, z, z \rangle + 4\delta \langle z, z, z, z \rangle + 3(2 + \delta) \langle z, 1, z \rangle \\ & \quad \left. - \frac{3}{2}(2 + \delta) \langle +, 1, - \rangle + (3 + 2\delta + 2\delta^2) (\langle +, - \rangle - 2 \langle z, z \rangle) \right]. \end{aligned}$$

Der Unterschied zu Gleichung (B.22) besteht in Termen der Form

$$\begin{aligned} & \langle [H', A] \rangle = 0 \quad \text{mit} \quad A = \langle z, z, z \rangle, \langle z, +, - \rangle \text{ oder } \langle +, -, z \rangle, \\ & \Rightarrow \quad \langle z, z, +, - \rangle + \langle -, +, z, z \rangle = \langle +, -, z, z \rangle + \langle z, z, -, + \rangle \quad (\text{B.23}) \\ & \text{und} \quad \langle -, +, +, - \rangle + 2 \langle +, z, -, z \rangle = \langle +, -, -, + \rangle + 2 \langle z, +, z, - \rangle. \end{aligned}$$

Unter Benutzung dieser Relationen, die aufgrund von Gleichung (B.2) gelten, kann der Ausdruck für m_3 aus [63] in denjenigen aus Gleichung (B.22) überführt werden.

B.3 Momente in h-Richtung

Zur Herleitung von Gleichung (4.15) wird die Definition (4.1b) der dynamischen Suszeptibilität in die Definition (4.13) der Momente M_n eingesetzt und die Zeitabhängigkeit der dynamischen

Korrelationsfunktion $\langle [S^+(t), S^-] \rangle_T$ in folgender Form entwickelt,

$$\langle [S^+(t), S^-] \rangle_T = e^{-iht} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(it)^k}{k!} \underbrace{\left[(-i\partial_t)^k \left(e^{iht} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T \right) \right]_{t=0}}_{= 2L(-J)^k m_k(T, h)}. \quad (\text{B.24})$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} M_n(T, \omega) &= \frac{J^{-n}}{4\pi L} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (h - \omega)^n e^{i\omega t} \langle [S^+(t), S^-] \rangle_T dt dh \\ &= \frac{J^{-n}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (h - \omega)^n e^{i(\omega-h)t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-itJ)^k}{k!} m_k(T, h) dt dh \\ &= \frac{J^{-n}}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{J^k}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} [m_k(T, h)(h - \omega)^n] \partial_h^k e^{i(\omega-h)t} dh dt \\ &= \frac{J^{-n}}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-J)^k}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-h)t} dt}_{= 2\pi\delta(\omega-h)} \partial_h^k [m_k(T, h)(h - \omega)^n] dh \\ &= J^{-n} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-J)^k}{k!} \partial_h^k [m_k(T, h)(h - \omega)^n]_{h=\omega}. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Im vorletzten Schritt wurde k -mal partiell integriert und im letzten die Integration über die δ -Funktion ausgewertet. Für die k -fache Ableitung nach h wird nun die Produktregel angewendet und ausgenutzt, dass nur die Terme beitragen, für die der zweite Term genau n -mal abgeleitet wird,

$$\begin{aligned} \partial_h^k [m_k(T, h)(h - \omega)^n]_{h=\omega} &= \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \partial_h^j m_k(T, h) \underbrace{\partial_h^{k-j} (h - \omega)^n}_{= n! \delta_{n, k-j}} \Big|_{h=\omega} \\ &= \underbrace{\binom{k}{k-n} n!}_{= k!/(k-n)!} \underbrace{\partial_h^{k-n} m_k(T, h)}_{=: m_k^{(k-n)}(T, \omega)} \Big|_{h=\omega}. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

Dieses Ergebnis gilt für $k \geq n$. Für $k < n$ kommt bei der k -fachen Ableitung an der Stelle $h = \omega$ Null heraus. Eingesetzt in Gleichung (B.25) liefert dies schließlich

$$M_n(T, \omega) = (-1)^n \sum_{k=n}^{\infty} \frac{(-J)^{k-n}}{(k-n)!} m_k^{(k-n)}(T, \omega) = (-1)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-J)^k}{k!} m_{k+n}^{(k)}(T, \omega). \quad (\text{B.27})$$

Dies ist Formel (4.15) des Haupttextes.

B.4 Hochtemperaturentwicklungen für die XXZ-Kette

Im Folgenden wird die Methode zur Bestimmung der Hochtemperaturentwicklung der Momente $m_{n \leq 3}$ und $M_{n \leq 2}$ vorgestellt. Ausgangspunkt stellen die Formeln (4.11) und (B.27) dar. Jede Ablei-

tion in (B.27) liefert einen Faktor $\beta = 1/T$. Damit gilt

$$M_0 = m_0 - Jm'_1 + \frac{J^2}{2}m''_2 - \frac{J^3}{6}m'''_3 + \mathcal{O}(\beta^4), \quad (\text{B.28a})$$

$$M_1 = -m_1 + Jm'_2 - \frac{J^2}{2}m''_3 + \mathcal{O}(\beta^3), \quad (\text{B.28b})$$

$$M_2 = m_2 - Jm'_3 + \frac{J^2}{2}m''_4 - \frac{J^3}{6}m'''_5 + \mathcal{O}(\beta^4). \quad (\text{B.28c})$$

Die Momente $m_{n \leq 5}$ sind gegeben durch kurzreichweitige Korrelationsfunktionen. Alle Erwartungswerte in den Ausdrücken für $m_{n \leq 5}$ sind von der Form $\langle A \rangle_T := \langle s_j^\alpha s_k^\beta \dots \rangle_T$ für α, β aus der Menge $\{z, +, -\}$ mit mindestens einem Operator s_i^z, s_i^\pm (siehe z. B. Gleichung (4.11)). Wegen

$$\langle A \rangle := \langle A \rangle_{T=\infty} = \langle A \rangle_{\beta=0} = \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} A \right\} = \frac{\text{Sp} \{ A \}}{\text{Sp} \{ \mathbb{1} \}} \quad (\text{B.29})$$

und $\text{Sp} \{ s_i^z \} = \text{Sp} \{ s_i^\pm \} = 0$ verschwinden diese in niedrigster Ordnung von β . Mit der Notation $\langle A \rangle^{(k)} = \partial_\beta^k \langle A \rangle_T |_{\beta=0}$ lautet die formale Hochtemperaturentwicklung demnach

$$\langle A \rangle_T = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\langle A \rangle^{(k)}}{k!} \beta^k = \langle A \rangle' \beta + \langle A \rangle'' \frac{\beta^2}{2} + \langle A \rangle''' \frac{\beta^3}{6} + \mathcal{O}(\beta^4). \quad (\text{B.30})$$

Für die Ableitungen $\partial_\beta^k \langle A \rangle_T$, $k = 1, 2, 3$, gilt

$$\begin{aligned} \partial_\beta \langle A \rangle_T &= \partial_\beta \left(\frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} A \right\} \right) = -\frac{\partial_\beta Z}{Z^2} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H} A \right\} + \frac{1}{Z} \text{Sp} \left\{ -e^{-\beta H} H A \right\} \\ &= \langle H \rangle_T \langle A \rangle_T - \langle H A \rangle_T, \end{aligned} \quad (\text{B.31a})$$

$$\begin{aligned} \partial_\beta^2 \langle A \rangle_T &= \left(\langle H \rangle_T^2 - \langle H^2 \rangle_T \right) \langle A \rangle_T + \langle H \rangle_T \left(\langle H \rangle_T \langle A \rangle_T - \langle H A \rangle_T \right) \\ &\quad - \left(\langle H \rangle_T \langle H A \rangle_T - \langle H^2 A \rangle_T \right), \end{aligned} \quad (\text{B.31b})$$

$$\partial_\beta^3 \langle A \rangle_T = 3 \langle H^2 \rangle_T \langle H A \rangle_T - \langle H^3 A \rangle_T + \dots \quad (\text{B.31c})$$

Mit der Notation (B.29) und wegen $\langle H \rangle = \langle A \rangle = 0$ für alle in den Korrelationsfunktionen auftretenden Operatoren A folgt

$$\langle A \rangle' = -\langle H A \rangle, \quad \langle A \rangle'' = \langle H^2 A \rangle, \quad \langle A \rangle''' = 3 \langle H^2 \rangle \langle H A \rangle - \langle H^3 A \rangle. \quad (\text{B.32})$$

Die Magnetisierung der XXZ-Kette im longitudinalen Magnetfeld mit $H = H_M - hS^z$ und H_M aus (4.10) liefert hierfür ein Beispiel,

$$\langle s_1^z \rangle' = -\langle H s_1^z \rangle = -\sum_{j=1}^L \left(J(s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y + (1 + \delta) s_j^z s_{j+1}^z) - h s_j^z \right) s_1^z = \frac{h}{4}, \quad (\text{B.33a})$$

$$\begin{aligned} \langle s_1^z \rangle'' &= \langle H^2 s_1^z \rangle = J^2 \overbrace{\langle H_{XXZ}^2 s_1^z \rangle}^{=0} - 2Jh \langle H_{XXZ} S^z s_1^z \rangle + h^2 \overbrace{\langle (S^z)^2 s_1^z \rangle}^{=0} \\ &= -4Jh \langle H_{XXZ} s_1^z s_2^z \rangle = -4Jh(1 + \delta) \langle s_1^z s_2^z s_1^z s_2^z \rangle = -\frac{Jh(1 + \delta)}{4}, \end{aligned} \quad (\text{B.33b})$$

$$\langle s_1^z \rangle''' = 3 \langle H^2 \rangle \langle H s_1^z \rangle - \langle H^3 s_1^z \rangle. \quad (\text{B.33c})$$

Hierbei wurde sowohl das Paritätsargument

$$\underbrace{\langle s_i^z s_j^z \cdots s_k^z \rangle}_{\text{ungerade Anzahl}} = 0 \quad \text{für alle } i, j, k \quad (\text{B.34})$$

als auch die Translationsinvarianz des Hamiltonoperators und der Erwartungswerte benutzt. Der Term $\langle H^2 \rangle$ wird für weitere Rechnungen benötigt und deshalb explizit berechnet

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle &= J^2 \langle H_{XXZ}^2 \rangle - 2Jh \underbrace{\langle H_{XXZ} S^z \rangle}_{=0} + h^2 \langle (S^z)^2 \rangle \\ &= \frac{J^2 L}{4} \langle (s_1^+ s_2^- + s_1^- s_2^+ + 2(1 + \delta) s_1^z s_2^z)^2 \rangle + h^2 L \langle (s_1^z)^2 \rangle \\ &= \frac{J^2 L}{4} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4} + 4(1 + \delta)^2 \frac{1}{16} \right) + \frac{h^2 L}{4} = L \left(\frac{J^2(3 + 2\delta + \delta^2)}{16} + \frac{h^2}{4} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Der zweite Term in dem Ausdruck für $\langle s_1^z \rangle'''$ lautet mit ähnlichen Paritätsargumenten wie oben

$$\langle H^3 s_1^z \rangle = -\frac{3hL}{4} \left(\frac{J^2(3 + 2\delta + \delta^2)}{16} + \frac{h^2}{4} \right) - \frac{3J^2 h \delta (\delta + 2)}{16} + \frac{h^3}{8}. \quad (\text{B.36})$$

Zusammenfassend ergibt sich also

$$m_0 = \langle s_1^z \rangle = \frac{h\beta}{4} - \frac{Jh(1 + \delta)\beta^2}{8} + \frac{J^2 h \beta^3}{48} \left(\frac{3}{2} \delta (\delta + 2) - \frac{h^2}{J^2} \right) + \mathcal{O}(\beta^4). \quad (\text{B.37a})$$

Analog gilt mit Gleichung (4.11) für die Momente m_1 , m_2 und m_3

$$m_1 = \frac{J\delta^2\beta}{8} - \frac{J^2\delta^2\beta^2}{32} - \frac{h^2\delta\beta^2}{8} + \frac{Jh^2\delta(3 + 2\delta)\beta^3}{32} + (\text{Terme ohne } h) \cdot \beta^3 + \mathcal{O}(\beta^4), \quad (\text{B.37b})$$

$$m_2 = \frac{h\delta^2\beta}{8} - \frac{Jh\delta^2(1 + 2\delta)\beta^2}{16} + \frac{J^2 h \delta^2 \beta^3}{96} \left(\frac{15}{4} \delta^2 + \frac{15}{2} \delta + \frac{3}{4} + 2 \frac{h^2}{J^2} \right) + \mathcal{O}(\beta^4), \quad (\text{B.37c})$$

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{J\delta^2(2\delta^2 + 2\delta + 3)\beta}{16} - \frac{h^2\delta^2(1 + 4\delta)\beta^2}{32} + \frac{Jh^2\delta^2\beta^3}{16} \left(\delta^2 + \frac{5}{8}\delta - \frac{7}{8} \right) \\ &\quad + (\text{Terme ohne } h) + \mathcal{O}(\beta^4). \end{aligned} \quad (\text{B.37d})$$

Um die Hochtemperaturentwicklungen der Momente $M_{n \leq 1}$ aus Gleichung (B.28) explizit zu berechnen, müssen die Ableitungen nach h gebildet werden. Hierbei fällt auf, dass die führenden Terme von m_1 und Jm_2' identisch sind und demnach in der Differenz wegfallen. Ausgewertet an der Stelle $h = \omega$ ergeben sich für M_0 und M_1 die Gleichungen (4.21a) und (4.21b) des Haupttextes.

Für M_2 müssen noch m_4'' und m_5''' bestimmt werden. Für die zwei- und dreifachen Ableitungen nach h gilt analog zu den Gleichungen (B.32)

$$\frac{\partial_h^2 \langle A \rangle_T}{\beta^2} \Big|_{\beta=0} = \langle (S^z)^2 A \rangle, \quad \frac{\partial_h^3 \langle A \rangle_T}{\beta^3} \Big|_{\beta=0} = \langle (S^z)^3 A \rangle - 3 \langle (S^z)^2 \rangle \langle S^z A \rangle. \quad (\text{B.38})$$

Da die Korrelationsfunktionen von $m_5 = \langle A_5 \rangle_T$ genau wie die von m_1 und m_3 stets eine gerade Anzahl von s_i^z -Operatoren enthalten, gilt mit dem obigen Paritätsargument (B.34)

$$\left. \frac{m_5'''}{\beta^3} \right|_{\beta=0} = \langle (S^z)^3 A_5 \rangle - 3 \langle (S^z)^2 \rangle \langle S^z A_5 \rangle = 0 \quad (\text{B.39})$$

und damit $m_5''' = \mathcal{O}(\beta^4)$. Zur Bestimmung von m_4'' bis zur dritten Ordnung wird zunächst der Term

$$\left. \frac{m_4'''}{\beta^3} \right|_{\beta=0} = \langle (S^z)^3 A_4 \rangle - 3 \langle (S^z)^2 \rangle \langle S^z A_4 \rangle \quad (\text{B.40})$$

berechnet. Gleichung (B.40) besagt, dass vom Operator A_4 nur die Terme beitragen, in denen ausschließlich s_i^z - und keine s_i^\pm -Operatoren vorkommen. Eine Rechnung unter Anwendung der Rechenregeln (B.13) aus Abschnitt B.2 und der Abbildung φ aus (B.15) liefert für diesen Term den Ausdruck

$$\frac{\delta^2}{2} \left[\left(\frac{3}{2} + \delta + \delta^2 \right) s_1^z + (4\delta^2 - 3) s_1^z s_2^z s_3^z - 2(1 + \delta)(s_1^z s_2^z s_4^z + s_1^z s_3^z s_4^z) + 4s_1^z s_2^z s_3^z s_4^z s_5^z \right].$$

Damit folgt

$$\left. \frac{m_4'''}{\beta^3} \right|_{\beta=0} = \frac{\delta^2}{8} \left(\delta^2 - 2\delta - \frac{27}{8} \right). \quad (\text{B.41})$$

Da $m_4 = \langle A_4 \rangle_T$ eine ungerade Funktion in h ist, folgt durch Integration bezüglich h

$$\frac{J^2}{2} m_4'' = \frac{J^2 h \delta^2 \beta^3}{16} \left(\delta^2 - 2\delta - \frac{27}{8} \right) + \mathcal{O}(\beta^4). \quad (\text{B.42})$$

Dies stellt die dritte Ordnung von m_4'' dar, weil niedrigere Ordnungen aufgrund von Gleichung (B.40) nicht vorkommen können. Zusammenfassend mit den Gleichungen (B.37) ergibt sich für M_2 an der Stelle $h = \omega$ Gleichung (4.21c) des Haupttextes.

Zum Abschluss wird noch die niedrigste Ordnung von m_5 angegeben. Mit Hilfe des Paritätsarguments und mehrfacher Anwendung der Funktion φ aus (B.15) folgt nach kurzer Rechnung

$$m_5 = \frac{J\delta^2}{8T} \left(\frac{57}{8} + \frac{69}{8}\delta + \frac{25}{4}\delta^2 + 2\delta^3 + \delta^4 \right) + \mathcal{O}(T^{-2}). \quad (\text{B.43})$$

Dieser Term wird in Abschnitt 6.2 mit dem sechsten Moment der normal-inversen Gaußverteilung verglichen.

B.5 Dynamische Suszeptibilität im Grenzfall unendlich hoher Temperatur

In Abschnitt 2.2.2 wurde aus der Spektraldarstellung der dynamischen Suszeptibilität folgende Formel hergeleitet,

$$\chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{2L} (1 - e^{-\frac{\omega}{T}}) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle S^+(t) S^- \rangle_T dt. \quad (\text{B.44})$$

Wegen des Vorfaktors $(1 - e^{-\frac{\omega}{T}})$ verschwindet die dynamische Suszeptibilität im Limes $T \rightarrow \infty$ identisch, und zwar mindestens mit der Ordnung $1/T$ (vergleiche hierzu Formel (2.44) von Kubo und Tomita [58]). Um den führenden Hochtemperatur-Beitrag zur dynamischen Suszeptibilität zu erhalten, wird Gleichung (B.44) mit einem Faktor $2T/\omega\pi$ skaliert und dann der Limes $T \rightarrow \infty$ durchgeführt,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{\omega\pi} \chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{\pi L} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle S^+(t) S^- \rangle_T dt. \quad (\text{B.45})$$

Der Faktor $2/\omega\pi$ sorgt dafür, dass die rechte Seite auf Eins normiert ist,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi L} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega}_{= 2\pi\delta(t)} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle S^+(t) S^- \rangle_T dt = \frac{2}{L} \sum_{i,j=1}^L \underbrace{\lim_{T \rightarrow \infty} \langle s_i^+ s_j^- \rangle_T}_{= \delta_{ij}/2} = 1. \quad (\text{B.46})$$

Für ein $U(1)$ -symmetrisches Modell mit $H = H_M - hS^z$ und $[H_M, S^z] = 0$ gilt

$$S^+(t) = e^{-iht} e^{itH_M} S^+ e^{-itH_M}. \quad (\text{B.47})$$

Die rechte Seite von (B.45) hängt dann nur noch von der Differenz $\omega - h$ ab, weil die dynamische Korrelationsfunktion $\langle e^{itH_M} S^+ e^{-itH_M} S^- \rangle_T$ im Limes $T \rightarrow \infty$ von h unabhängig ist,

$$\phi(\omega - h) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{\omega\pi} \chi''_{+-}(\omega, h) = \frac{1}{\pi LZ'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-h)t} \text{Sp} \{ e^{itH_M} S^+ e^{-itH_M} S^- \} dt, \quad (\text{B.48})$$

wobei $Z' = \text{Sp}\{\mathbb{1}\}$ definiert wurde. Der Argumentation aus Abschnitt (2.2.2) folgend, ist $\phi(\omega) \geq 0$ für alle $\omega \in \mathbb{R}$ und kann damit als Verteilung interpretiert werden. Für Hamiltonoperatoren H_M , die unter Spinumkehr invariant sind, ist ϕ symmetrisch,

$$\begin{aligned} \phi(-\omega) &= \frac{1}{\pi LZ'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \text{Sp} \{ e^{itH_M} S^+ e^{-itH_M} S^- \} dt \\ &= \frac{1}{\pi LZ'} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \underbrace{\text{Sp} \{ e^{-itH_M} S^+ e^{itH_M} S^- \}}_{= \text{Sp} \{ e^{itH_M} S^+ e^{-itH_M} S^- \}} dt = \phi(\omega). \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

Hierbei wurde im letzten Schritt die zyklische Invarianz der Spur benutzt. Für den Fall einer symmetrischen Verteilung verschwinden die ungeraden Momente. Die geraden Momente von ϕ lauten mit der dimensionslosen Größe $x = (\omega - h)/J$

$$\begin{aligned} \langle x^{2n} \rangle_\phi &:= J^{-2n} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - h)^{2n} \phi(\omega - h) dh \\ &= J^{-2n} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\omega - h)^{2n-1} \underbrace{\omega \phi(\omega - h)}_{= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2T}{\pi} \chi''_{+-}} d\omega - h \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} (\omega - h)^{2n-1} \phi(\omega - h) d\omega}_{\substack{\text{ungerade} \\ = 0}} \right] \\ &\stackrel{(4.3)}{=} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{4T}{J} m_{2n-1}(T, h). \end{aligned} \quad (\text{B.50})$$

Mit den Gleichungen (B.37) und (B.43) folgt für die XXZ-Kette (4.10)

$$\langle x^2 \rangle_\phi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{4T}{J} m_1(T, h) = \frac{\delta^2}{2}, \quad (\text{B.51a})$$

$$\langle x^4 \rangle_\phi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{4T}{J} m_3(T, h) = \frac{\delta^2}{2} \left(\delta^2 + \delta + \frac{3}{2} \right), \quad (\text{B.51b})$$

$$\langle x^6 \rangle_\phi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{4T}{J} m_5(T, h) = \frac{\delta^2}{2} \left(\frac{57}{8} + \frac{69}{8} \delta + \frac{25}{4} \delta^2 + 2\delta^3 + \delta^4 \right). \quad (\text{B.51c})$$

Wird die Notation der Arbeit [106] von van Vleck an die hier verwendete angepasst, $A_{jk} \rightarrow J$ und $B_{jk} \rightarrow J\delta$ für nächste Nachbarn und Null sonst, so stimmen der Hamiltonoperator (2.49) von van Vleck und der der XXZ-Kette aus Gleichung (4.10) überein, und der Ausdruck für die Linienbreite (2.50) von van Vleck geht für $S = 1/2$ in den aus Gleichung (B.51a) über. Das bedeutet, dass das Resultat von van Vleck aus [106] mit der in dieser Arbeit vorgestellten Momentenmethode im Grenzfall unendlich hoher Temperatur reproduziert werden kann.

C Technische Details zur Berechnung des Zwei-Spinonen Anteils

In diesem Teil des Anhangs befinden sich einige Rechnungen und technische Details zu Kapitel 7, die deswegen ausgelagert wurden, weil sie sonst den Lesefluss des Haupttextes beeinträchtigt hätten.

C.1 Gleichungen der Energien und Impulse

Im Folgenden werden die Gleichungssysteme (7.20) gelöst. Werden die Spinonenimpulse (7.15b) in die zweite Gleichung von (7.20a) eingesetzt, so folgt

$$\operatorname{am}\left(\frac{2K}{\pi}\theta_1^{(l)}\right) + \operatorname{am}\left(\frac{2K}{\pi}\theta_2^{(l)}\right) = 0. \quad (\text{C.1})$$

Da die Funktion am ungerade und streng monoton steigend ist, folgt $\theta := \theta_1^{(l)} = -\theta_2^{(l)}$ und damit $\xi_1^{(l)}\xi_2^{(l)} = -1$ wegen $\xi_{1,2}^{(l)} = -ie^{i\theta_{1,2}^{(l)}}$. Da weiterhin dn eine gerade Funktion ist, lautet die erste Gleichung von (7.20a)

$$\omega = E(\xi_1^{(l)}, \xi_2^{(l)}) = \hat{e}(\theta_1^{(l)}) + \hat{e}(\theta_2^{(l)}) = 2\hat{e}(\theta) = 2I \operatorname{dn}\left(\frac{2K}{\pi}\theta\right). \quad (\text{C.2})$$

Damit ist Gleichung (7.21) bewiesen.

Das andere Gleichungssystem (7.20b) kann auf gleiche Weise gelöst werden. Wegen des fehlenden Summanden π in der zweiten Gleichung gilt $\theta := \theta_1^{(l)} = \pm\pi - \theta_2^{(l)}$ und damit $\xi_1^{(l)}\xi_2^{(l)} = +1$. Da die Funktion dn eine Periodizität von $2K$ besitzt, führt die erste Gleichung von (7.20b) wieder auf (7.21).

Die Relation (C.2) zwischen ω und θ mit $-\pi < \theta \leq \pi$ kann wegen der Periodizität von dn für $k' < \omega/2I < 1$ auf vier und für $\omega/2I = k'$ oder $\omega/2I = 1$ auf zwei verschiedene Weisen erfüllt werden. Für $\omega/2I < k'$ oder $\omega/2I > 1$ gibt es keine Lösung. Dieser Umstand erklärt die beiden Heaviside-Funktionen Θ in Gleichung (7.25a). Für den interessanten Fall von vier verschiedenen Lösungen existiert immer eine im Intervall $(0, \pi/2)$ und die anderen drei folgen durch Symmetrie,

$$\theta := \theta^{(1)} \in (0, \pi/2), \quad \theta^{(2)} = -\theta, \quad \theta^{(3)} = \pi - \theta, \quad \theta^{(4)} = -\pi + \theta. \quad (\text{C.3})$$

Die entsprechenden ξ 's lauten

$$\xi^{(1)} = \xi = -ie^{i\theta}, \quad \xi^{(2)} = -1/\xi, \quad \xi^{(3)} = 1/\xi, \quad \xi^{(4)} = -\xi. \quad (\text{C.4})$$

C.2 Berechnung der Matrixelemente

Die Matrixelemente ${}_i\langle 0|s_0^+|\xi\rangle_i$ mit $i = 0, 1$ aus Gleichung (7.16) werden in Kapitel 9.2 von [43] berechnet. Der explizite Ausdruck lautet (letzte Gleichung in Kapitel 9.2 mit $q = -p$)

$${}_i\langle 0|s_0^+|\xi\rangle_i = p^{1-i}\xi_1^{1-i}\xi_2^{2-i}(p^2, p^4)(p^4, p^4)^3\rho^2\frac{\gamma(\xi_2^2/\xi_1^2)\theta_{p^8}(-p^{4i}\xi_1^{-2}\xi_2^{-2})}{\theta_{p^4}(-p^3/\xi_1^2)\theta_{p^4}(-p^3/\xi_2^2)} \quad (\text{C.5})$$

mit

$$\rho = \frac{(p^4, p^4, p^4)}{(p^6, p^4, p^4)}, \quad (\text{C.6})$$

$$\theta_x(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-z)^n x^{n(n-1)/2} = (x, x)(z, x)(z^{-1}x, x), \quad (\text{C.7})$$

$$\gamma(u) = \frac{(p^4u, p^4, p^4)(u^{-1}, p^4, p^4)}{(p^6u, p^4, p^4)(p^2u^{-1}, p^4, p^4)}, \quad (\text{C.8})$$

$$(x, y, z) = \prod_{m,n=0}^{\infty} (1 - xy^m z^n), \quad (\text{C.9})$$

$$(x, y) = (x, y, 0) = \prod_{m=0}^{\infty} (1 - xy^m). \quad (\text{C.10})$$

Wegen $\xi_1^{(l)}\xi_2^{(l)} = -1$ für alle vier Lösungen $l = 1, \dots, 4$ der Impulsbedingung des Gleichungssystems (7.20a) und $\xi_1^{(l)}\xi_2^{(l)} = +1$ für alle vier Lösungen von (7.20b) gilt

$${}_0\langle 0|s_0^+|\xi\rangle_0 \pm {}_1\langle 0|s_0^+|\xi\rangle_1 = \pm [\theta_{p^8}(-p^4) - p\theta_{p^8}(-1)] \frac{(p^2, p^4)(p^4, p^4)^3\rho^2\gamma(\xi_2^4)\xi_2}{\theta_{p^4}(-p^3\xi_2^2)\theta_{p^4}(-p^3\xi_2^{-2})}. \quad (\text{C.11})$$

Das Betragsquadrat

$$|B(\theta)|^2 = [\theta_{p^8}(-p^4) - p\theta_{p^8}(-1)]^2 \frac{(p^2, p^4)^2(p^4, p^4)^6\rho^4\gamma(\xi_2^4)\gamma(\xi_2^{-4})}{\theta_{p^4}^2(-p^3\xi_2^2)\theta_{p^4}^2(-p^3\xi_2^{-2})} \quad (\text{C.12})$$

hängt nicht vom Vorzeichen in Gleichung (C.11) ab. Das bedeutet, dass alle acht Lösungen beider Fälle den gleichen Ausdruck liefern. Mit der Relation $\hat{\omega} = \text{dn}(2K\theta/\pi)$ ist der Wert von $|B(\theta)|^2$ für $\theta \in (0, \pi/2)$ eindeutig festgelegt. Wird $\xi = -ie^{i\theta}$ gesetzt und die Struktur (C.4) der Lösungen benutzt, so ergibt sich schließlich für alle acht Lösungen

$$|B(\theta)|^2 = \rho^4(p^2, p^4)^2(p^4, p^4)^6 |\theta_{p^8}(-p^4) - p\theta_{p^8}(-1)|^2 \frac{\gamma(\xi^4)\gamma(\xi^{-4})}{\theta_{p^4}^2(-p^3\xi^2)\theta_{p^4}^2(-p^3\xi^{-2})}. \quad (\text{C.13})$$

Zur besseren Übersicht wird das Betragsquadrat in drei Faktoren zerlegt,

$$|B(\theta)|^2 = \bar{m}_z^2 \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} \quad \text{mit} \quad \bar{m}_z^2 = (p^2, p^2)^2(p^2, p^4)^6(p^4, p^4)^2 = \left(\frac{2K}{\pi}\right)^2 k', \quad (\text{C.14})$$

$$\vartheta_A^2(\theta) = \rho^4 \frac{\gamma(\xi^4)\gamma(\xi^{-4})}{(p^2, p^4)^4} = \frac{\gamma(\xi^4)\gamma(\xi^{-4})}{\gamma(p^{-2})\gamma(p^{-2})},$$

$$\vartheta_n(\theta) = \frac{(p^2, p^2)\theta_{p^4}(-p^3\xi^2)\theta_{p^4}(-p^3\xi^{-2})}{(p^4, p^4)^2[\theta_{p^8}(-p^4) - p\theta_{p^8}(-1)]} = \frac{\vartheta_4(\theta, p)}{\vartheta_4(0, p)},$$

wobei einige Eigenschaften der in (C.7)–(C.10) definierten Funktionen sowie die Definitionen und einige Relationen der folgenden ϑ -Funktionen benutzt wurden [61],

$$\begin{aligned}
 \vartheta_1(\alpha, p) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-)^n p^{(n+1/2)^2} \sin(2n+1)\alpha = 2p^{1/4} \sin \alpha(p^2; p^2)(-zp^2; p^2)(-z^{-1}p^2; p^2), \\
 \vartheta_2(\alpha, p) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} p^{(n+1/2)^2} \cos(2n+1)\alpha = 2p^{1/4} \cos \alpha(p^2; p^2)(zp^2; p^2)(z^{-1}p^2; p^2), \\
 \vartheta_3(\alpha, p) &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} p^{n^2} \cos 2n\alpha = (p^2; p^2)(zp; p^2)(z^{-1}p; p^2), \\
 \vartheta_4(\alpha, p) &= 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n p^{n^2} \cos 2n\alpha = (p^2; p^2)(-zp; p^2)(-z^{-1}p; p^2), \\
 \\
 \vartheta_1(0, p) &= 0, & \vartheta_2(0, p) &= 2p^{1/4}(p^2; p^2)(-p^2; p^2)^2 = \sqrt{\frac{2kK}{\pi}}, \\
 \vartheta_3(0, p) &= (p^2; p^2)(-p; p^2)^2 = \sqrt{\frac{2K}{\pi}}, & \vartheta_4(0, p) &= (p^2; p^2)(p; p^2)^2 = \sqrt{\frac{2k'K}{\pi}}.
 \end{aligned} \tag{C.15}$$

Damit gilt schließlich

$$|B(\theta)|^2 = \left(\frac{2K}{\pi}\right)^2 k' \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)}. \tag{C.16}$$

Um die beiden Limes $\Delta \rightarrow \infty$ und $\Delta \rightarrow 1$ durchzuführen, ist es vorteilhaft, die Moduli k und k' sowie die elliptischen Integrale K und K' als Funktionen von p mit $\Delta = (p + p^{-1})/2$ zu schreiben,

$$\begin{aligned}
 k(p) &= \vartheta_2^2(0, p)/\vartheta_3^2(0, p), & K(p) &= \frac{\pi}{2} \vartheta_3^2(0, p), \\
 k'(p) &= \vartheta_4^2(0, p)/\vartheta_3^2(0, p), & K'(p) &= -\frac{K(p)}{\pi} \ln p.
 \end{aligned} \tag{C.17}$$

C.3 Integrierte Suszeptibilität im Ising-Limes

Es wird das Integral von $\chi^{(2)}$ über positive Frequenzen ω im Limes $\Delta \rightarrow \infty$, d. h. $p \rightarrow 0$ berechnet,

$$\int_0^{\infty} \chi^{(2)}(\omega) d\omega = \frac{k'K}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\operatorname{dn}\left(\frac{2K}{\pi}\theta\right)} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} d\theta, \tag{C.18}$$

wobei Gleichung (7.25a) eingesetzt und die Variable ω durch θ mit Hilfe der Relation (7.21) substituiert wurde. Wegen $K \rightarrow \pi/2$ und $k' \rightarrow 1$ gilt $\operatorname{dn}(2K\theta/\pi) \rightarrow \operatorname{dn}(\theta) \rightarrow 1$ und $\vartheta_n(\theta) \rightarrow 1$ für alle $\theta \in (0, \pi/2)$ und damit

$$\int_0^{\infty} \chi^{(2)}(\omega) d\omega \rightarrow \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \vartheta_A^2(\theta) d\theta. \tag{C.19}$$

Der Grenzübergang $p \rightarrow 0$ für die Funktion ϑ_A ist etwas komplizierter. Unter Benutzung der Definitionen (7.25c)–(7.25e) von ϑ_A und der Relation

$$\ln \left(\prod_{n_1, \dots, n_m \geq 0} (1 - zp_1^{n_1} \cdots p_m^{n_m}) \right) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1-p_1^n) \cdots (1-p_m^n)} \frac{z^n}{n}, \tag{C.20}$$

lässt sich die Funktion γ aus (7.25d) mit $z = e^{2i\theta}$ und $\epsilon = \pi K'/K$ schreiben als

$$\frac{\gamma(z)}{\gamma(p^{-2})} = \exp \left(- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}^2(n(\epsilon - 2i\theta)) e^{n\epsilon}}{\operatorname{sh}(2n\epsilon) \operatorname{ch}(n\epsilon) n} \right). \tag{C.21}$$

Damit folgt

$$\vartheta_A^2(\theta) = \exp\left(-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(2n\epsilon) \cos(4n\theta) - 1}{\operatorname{sh}(2n\epsilon) \operatorname{ch}(n\epsilon)} \frac{e^{n\epsilon}}{n}\right). \quad (\text{C.22})$$

Um den Ising-Limes durchzuführen, wird der letzte Ausdruck für ϑ_A mit Hilfe einer kurzen Rechnung auf folgende Form gebracht,

$$\begin{aligned} \ln(\vartheta_A(\theta)) = \ln[2 \sin(2\theta)] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \frac{p^{2n}}{1-p^{2n}} \sin^2(2n\theta) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \frac{p^{2n}}{1+p^{2n}} \cos^2(2n\theta) \\ + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \frac{p^{2n}}{(1+p^{2n})^2} \cos^2(2n\theta). \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

Damit folgt unmittelbar $\vartheta_A(\theta) \xrightarrow{p \rightarrow 0} 2 \sin(2\theta)$ und schließlich

$$\int_0^{\infty} \chi^{(2)}(\omega) d\omega \xrightarrow{\Delta \rightarrow 1} 2 \int_0^{\pi/2} \sin^2(2\theta) d\theta = \frac{\pi}{2}. \quad (\text{C.24})$$

Das Integral über den Zwei-Spinonen-Anteil der dynamischen Suszeptibilität verschwindet also im Ising-Limes nicht, obwohl $\chi^{(2)}(\omega) \rightarrow 0$ für alle $\omega \neq J$.

C.4 Integrierte Intensität und isotroper Limes

Im Folgenden wird das Verhalten des Zwei-Spinonen-Anteils zur integrierten Intensität (7.31),

$$I_0^{(2)}(\Delta) = \frac{2k'KI}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} d\theta, \quad (\text{C.25})$$

im isotropen Limes $\Delta \rightarrow 1$, d. h. $p \rightarrow 1$ und damit $K \rightarrow \infty$ sowie $I \rightarrow \pi/2$, untersucht. Einerseits gilt in diesem Limes $\vartheta_n(\theta) \rightarrow \operatorname{ch}(2K\theta/\pi) \rightarrow \infty$ und $k' \rightarrow 0$, andererseits aber auch $\vartheta_A(\theta, p) \rightarrow \infty$. Um explizite Resultate zu erhalten, wird zunächst die absorbierte Intensität mit k' skaliert und danach der isotrope Limes durchgeführt. Hierzu wird die Funktion

$$f\left(\frac{2K}{\pi}\theta\right) = \lim_{p \rightarrow 1} \vartheta_A^2(\theta, p), \quad (\text{C.26})$$

definiert, die berechnet werden kann zu

$$f(\beta) = \frac{e^{-12\zeta'(-1)}}{2^{1/3}\pi} \beta \operatorname{sh}(\beta) \left[\Psi\left(\frac{\beta}{\pi}\right)\right]^{-2i\beta/\pi} \exp\left\{\frac{2i}{\pi} \int_0^{\beta} \ln\left[\Psi\left(\frac{\beta'}{\pi}\right)\right] d\beta'\right\}, \quad (\text{C.27})$$

wobei Ψ durch

$$\Psi(x) = \frac{\Gamma(1-ix)\Gamma(1/2+ix)}{\Gamma(1+ix)\Gamma(1/2-ix)} \quad (\text{C.28})$$

gegeben ist. Sie ist in Abbildung 7.2 als Grenzfunktion graphisch dargestellt. Mit der Substitution $\beta = 2K\theta/\pi$ folgt

$$\begin{aligned} \kappa := \lim_{p \rightarrow 1} \left(\frac{I_0^{(2)}}{k'}\right) &= \lim_{p \rightarrow 1} \left(\frac{2KI}{\pi}\right) \int_0^{\pi/2} \frac{\vartheta_A^2(\theta)}{\vartheta_n^2(\theta)} d\theta = \lim_{p \rightarrow 1} I \int_0^{K(p)} \frac{\vartheta_A^2\left(\frac{\pi\beta}{2K}, p\right)}{\vartheta_n^2\left(\frac{\pi\beta}{2K}\right)} d\beta \\ &= \frac{\pi}{2} \int_0^{\infty} \frac{f(\beta)}{\operatorname{ch}^2 \beta} d\beta = 2.647126 \dots \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Unter Benutzung von (C.15) und (C.17) führt eine kurze Rechnung auf

$$\ln [k'(p)] = 4 \ln [(p, p^2)] - 4 \ln [(-p, p^2)] \xrightarrow{p \rightarrow 1} -\frac{\pi^2}{2(1-p)} + 2 \ln 2 + \frac{\pi^2}{4} + \mathcal{O}(1-p). \quad (\text{C.30})$$

Das asymptotische Verhalten von $I_0^{(2)}$ lautet demzufolge wegen $1-p = \sqrt{\Delta^2 - 1} - (\Delta - 1)$

$$I_0^{(2)}(\Delta) \xrightarrow{\Delta \rightarrow 1} C e^{-\frac{\pi^2}{2(1-p)}} (1 + \mathcal{O}(1-p)), \quad (\text{C.31})$$

wobei die Konstante C den Wert $C = 4e^{\pi^2/4} \kappa \approx 124.857$ besitzt.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun (eds.), *Handbook of mathematical functions*, 8th ed., Dover Publications, Inc., New York, 1975.
- [2] Y. Ajiro, *ESR experiments on quantum spin systems*, J. Phys. Soc. Jpn., Suppl. B 72 (2003), 12–25.
- [3] M. Arikawa, M. Karbach, G. Müller, and K. Wiele, *Spinon excitations in the XX chain: spectra, transition rates, observability*, J. Phys. A 39 (2006), 10623.
- [4] B. Aufgebauer and A. Klümper, *Finite temperature correlation functions from discrete functional equations*, preprint, arXiv:1205.5702v1, 2012.
- [5] O. Barndorff-Nielsen, *Hyperbolic distributions and distributions on hyperbolae*, Scand. J. Statist. 5 (1978), 151–157.
- [6] ———, *Normal inverse Gaussian distributions and stochastic volatility modelling*, Scand. J. Statist. 24 (1997), 1–13.
- [7] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Academic Press, London, 1982.
- [8] A. Bencini and D. Gatteschi, *Electron paramagnetic resonance of exchange coupled systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [9] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. 71 (1931), 205.
- [10] D. Biegel, M. Karbach, and G. Müller, *Transition rates via Bethe ansatz for the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain*, Europhys. Lett. 59 (2002), 882.
- [11] ———, *Transition rates via Bethe ansatz for the spin-1/2 planar XXZ antiferromagnet*, J. Phys. A 36 (2003), 5361.
- [12] H. Boos, J. Damerau, F. Göhmann, A. Klümper, J. Suzuki, and A. Weiße, *Short-distance thermal correlations in the XXZ chain*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2008), P08010.
- [13] H. Boos and F. Göhmann, *On the physical part of the factorized correlation functions of the XXZ chain*, J. Phys. A 42 (2009), 315001.
- [14] H. Boos, F. Göhmann, A. Klümper, and J. Suzuki, *Factorization of the finite temperature correlation functions of the XXZ chain in a magnetic field*, J. Phys. A 40 (2007), 10699.
- [15] H. Boos, M. Jimbo, T. Miwa, F. Smirnov, and Y. Takeyama, *Hidden Grassmann structure in the XXZ model*, Comm. Math. Phys. 272 (2007), 263.

- [16] ———, *Hidden Grassmann structure in the XXZ model II: creation operators*, *Comm. Math. Phys.* **286** (2009), 875.
- [17] A. H. Bougourzi, M. Couture, and M. Kacir, *Exact two-spinon dynamical correlation function of the Heisenberg model*, *Phys. Rev. B* **54** (1996), R12669.
- [18] A. H. Bougourzi, M. Karbach, and G. Müller, *Exact two-spinon dynamic structure factor of the one-dimensional $s = 1/2$ Heisenberg-Ising antiferromagnet*, *Phys. Rev. B* **57** (1998), 11429.
- [19] U. Brandt and K. Jacoby, *Exact results for the dynamics of one-dimensional spin-systems*, *Z. Phys. B* **25** (1976), 181–187.
- [20] M. Brockmann, F. Göhmann, M. Karbach, A. Klümper, and A. Weiße, *On the theory of microwave absorption by the spin-1/2 Heisenberg-Ising magnet*, *Phys. Rev. Lett.* **107** (2011), 017202.
- [21] ———, *Absorption of microwaves by the one-dimensional spin-1/2 Heisenberg-Ising magnet*, *Phys. Rev. B* **85** (2012), 134438.
- [22] J.-S. Caux and J. M. Maillet, *Computation of dynamical correlation functions of Heisenberg chains in a field*, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005), 077201.
- [23] J.-S. Caux, J. Mossel, and I. Pérez Castillo, *The two-spinon transverse structure factor of the gapped Heisenberg antiferromagnetic chain*, *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* (2008), P08006.
- [24] J. Choukroun, J.-L. Richard, and A. Stepanov, *High-temperature electron paramagnetic resonance in magnets with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 127207.
- [25] J. Des Cloizeaux and M. Gaudin, *Anisotropic Linear Magnetic Chain*, *J. Math. Phys.* **7** (1966), 1384.
- [26] P. M. Duxbury, J. Oitmaa, Michael N. Barber, A. van der Bilt, K. O. Joung, and Richard L. Carlin, *Transverse susceptibility of the one-dimensional antiferromagnetic XY model. Application to Cs_2CoCl_4* , *Phys. Rev. B* **24** (1981), 5149–5155.
- [27] S. El Shawish, O. Cépas, and S. Miyashita, *Electron spin resonance in $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnets at high temperature*, *Phys. Rev. B* **81** (2010), 224421.
- [28] M. Enderle, C. Mukherjee, B. Fak, R. K. Kremer, J.-M. Broto, H. Rosner, S.-L. Drechsler, J. Richter, J. Malek, A. Prokofiev, W. Assmus, S. Pujol, J.-L. Raggazzoni, H. Rakoto, M. Rheinstädter, and H. M. Ronnow, *Quantum helimagnetism of the frustrated spin- $\frac{1}{2}$ chain LiCuVO_4* , *Europhys. Lett.* **70** (2005), 237.
- [29] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*, Cambridge University Press, 2005.
- [30] K. Fabricius, U. Löw, and J. Stolze, *Dynamic correlations of antiferromagnetic spin-1/2 XXZ chains at arbitrary temperature from complete diagonalization*, *Phys. Rev. B* **55** (1997), 5833–5846.
- [31] M. E. Fisher, *Magnetism in one-dimensional systems – The Heisenberg model for infinite spin*, *Amer. J. Phys.* **32** (1964), 343.

- [32] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsevlik, *Bosonization and strongly correlated systems*, Cambridge University Press, 1998.
- [33] F. Göhmann, A. Klümper, and A. Seel, *Integral representations for correlation functions of the XXZ chain at finite temperature*, J. Phys. A **37** (2004), 7625.
- [34] ———, *Integral representation of the density matrix of the XXZ chain at finite temperature*, J. Phys. A **38** (2005), 1833.
- [35] C. J. Gorter and J. H. van Vleck, *The role of exchange interaction in paramagnetic absorption*, Phys. Rev. **72** (1947), 1128–1129.
- [36] J. P. Groen, T. O. Klaassen, N. J. Poulis, G. Müller, H. Thomas, and H. Beck, *Dynamics of the $s = \frac{1}{2}$ linear Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field: Experiment and theory*, Phys. Rev. B **22** (1980), 5369–5381.
- [37] P. R. Hammar, M. B. Stone, Daniel H. Reich, C. Broholm, P. J. Gibson, M. M. Turnbull, C. P. Landee, and M. Oshikawa, *Characterization of a quasi-one-dimensional spin-1/2 magnet which is gapless and paramagnetic for $g\mu_B h \lesssim j$ and $k_B T \ll j$* , Phys. Rev. B **59** (1999), 1008–1015.
- [38] J. Hartung, B. Elpelt, and K.-H. Klösener, *Statistik – Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik*, 15. Auflage, Oldenbourg, München, 2009.
- [39] W. Heisenberg, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **49** (1928), 619.
- [40] Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, *ESR-Spektrometer*, http://www.helmholtz-berlin.de/forschung/enma/si-pv/methoden/defektanalytik/esr/index_de.html, (Zuletzt aktualisiert am 11.06.2010, zuletzt geprüft am 10.06.2012).
- [41] L. Hulthén, *Über das Austauschproblem eines Kristalls*, Ark. Mat. Astr. Fys. **26A** (1938), 1.
- [42] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **31** (1925), 253–258.
- [43] M. Jimbo and T. Miwa, *Algebraic analysis of solvable lattice models*, American Mathematical Society, 1995.
- [44] M. Jimbo, T. Miwa, and F. Smirnov, *Hidden Grassmann structure in the XXZ model III: introducing Matsubara direction*, J. Phys. A **42** (2009), 304018.
- [45] P. Jordan and E. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*, Z. Phys. **47** (1928), 631.
- [46] J. Kanamori and M. Tachiki, *Collective motion of spins in ferro- and antiferromagnets*, J. Phys. Soc. Jpn. **17** (1962), 1384–1394.
- [47] M. Karbach, unpublished, 2002.
- [48] G. Kato, M. Shiroishi, M. Takahashi, and K. Sakai, *Third-neighbour and other four-point correlation functions of spin-1/2 XXZ chain*, J. Phys. A **37** (2004), 5097.
- [49] N. Kitanine, K. K. Kozłowski, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *On the thermodynamic limit of form factors in the massless XXZ Heisenberg chain*, J. Math. Phys. **50** (2009), 095209.

- [50] N. Kitanine, K. K. Kozłowski, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *A form factor approach to the asymptotic behavior of correlation functions in critical models*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. (2011), P12010.
- [51] ———, *The thermodynamic limit of particle-hole form factors in the massless XXZ Heisenberg chain*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **1105** (2011), P028.
- [52] A. Klümper, *Free energy and correlation length of quantum chains related to restricted solid-on-solid lattice models*, Ann. Physik **1** (1992), 540.
- [53] ———, *Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum chains*, Z. Phys. B **91** (1993), 507.
- [54] T. Kohmoto, T. Goto, S. Maegawa, N. Fujiwara, Y. Fukuda, M. Kunitomo, and M. Mekata, *Nuclear magnetic relaxation in an Ising-like antiferromagnet CsCoCl₃: Domain-wall dynamics*, Phys. Rev. B **57** (1998), 2936–2942.
- [55] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and A. G. Izergin, *Quantum inverse scattering method and correlation functions*, Cambridge University Press, 1993.
- [56] H.-A. Krug von Nidda, N. Büttgen, and A. Loidl, *Magnetic resonance in quantum spin chains*, The European Physical Journal - Special Topics **180** (2009), 161–189.
- [57] H.-A. Krug von Nidda, L. E. Svistov, M. V. Eremin, R. M. Eremina, A. Loidl, V. Kataev, A. Validov, A. Prokofiev, and W. Aßmus, *Anisotropic exchange in LiCuVO₄ probed by ESR*, Phys. Rev. B **65** (2002), 134445.
- [58] R. Kubo and K. Tomita, *A general theory of magnetic resonance absorption*, J. Phys. Soc. Jpn. **9** (1954), 888–919.
- [59] C. Lanczos, *An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators*, J. Res. Nat. Bur. Stand. **45** (1950), 255–282.
- [60] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics*, Pergamon Press, 1977.
- [61] D. F. Lawden, *Elliptic functions and applications*, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [62] W. P. Lehmann, W. Breitling, and R. Weber, *Raman scattering study of spin dynamics in the quasi-1D Ising antiferromagnets CsCoCl₃ and CsCoBr₃*, J. Phys. C **14** (1981), 4655.
- [63] B. Lenz, *Theorie der linearen Antwort von Spinsystemen*, Bachelorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, 2011.
- [64] S. Lukyanov, *Low energy effective Hamiltonian for the XXZ chain*, Nucl. Phys. B **522** (1998), 533.
- [65] A. Luther and I. Peschel, *Calculation of critical exponents in two dimensions from quantum field theory in one dimension*, Phys. Rev. B **12** (1975), 3908.
- [66] Y. Maeda, *Systematic perturbation theories on frequency shift in electron spin resonance and their applications to one-dimensional systems*, Ph.D. thesis, Tokyo Institute of Technology, 2005.

- [67] Y. Maeda and M. Oshikawa, *Numerical analysis of electron-spin resonance in the spin- $\frac{1}{2}$ XY model*, Phys. Rev. B **67** (2003), 224424.
- [68] Y. Maeda and M. Oshikawa, *Direct perturbation theory on the electron spin resonance shift and its applications*, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005), 283–286.
- [69] Y. Maeda, K. Sakai, and M. Oshikawa, *Exact analysis of ESR shift in the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain*, Phys. Rev. Lett. **95** (2005), 037602.
- [70] F. Matsubara and S. Inawashiro, *Simulation of solitons in an Ising-like $s = 1/2$ antiferromagnet on a linear chain*, Phys. Rev. B **41** (1990), 2284–2297.
- [71] ———, *Two-soliton excitations and spin-wave responses in the antiferromagnets CsCoBr₃ and CsCoCl₃*, Phys. Rev. B **43** (1991), 796–807.
- [72] F. Matsubara, S. Inawashiro, and H. Ohhara, *On the magnetic Raman scattering in CsCoCl₃, CsCoBr₃ and RbCoCl₃*, J. Phys.: Condens. Matter **3** (1991), 1815.
- [73] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I, Statics and Dynamics*, Springer Verlag, Berlin, 1982.
- [74] G. Mennenga, L.J. de Jongh, W.J. Huiskamp, and J. Reedijk, *Specific heat and susceptibility of the 1-dimensional $s = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet Cu(Pyrazine)(NO₃)₂ evidence for random exchange effects at low temperatures*, J. Magn. Magn. Mater. **44** (1984), 89–98.
- [75] N. D. Mermin and H. Wagner, *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models*, Phys. Rev. Lett. **17** (1966), 1133–1136.
- [76] S. Miyashita, T. Yoshino, and A. Ogasahara, *Direct calculation of dynamical susceptibility in strongly fluctuating quantum spin systems*, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999), 655–661.
- [77] H. Mori and K. Kawasaki, *Antiferromagnetic resonance absorption*, Prog. Theor. Phys. **28** (1962), 971–987.
- [78] ———, *Theory of dynamical behaviors of ferromagnetic spins*, Prog. Theor. Phys. **27** (1962), 529–570.
- [79] M. Motokawa, H. Ohta, H. Nojiri, and S. Kimura, *The role of ESR in research of low-dimensional antiferromagnets*, J. Phys. Soc. Jpn., Suppl. B **72** (2003), 1–11.
- [80] B. Náfrádi, A. Olariu, L. Forró, C. Mézière, P. Batail, and A. Jánossy, *Spin dynamics in the $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic chain compounds δ -(EDT-TTF-CONMe₂)₂X (X = AsF₆, Br): A multifrequency electron spin resonance study*, Phys. Rev. B **81** (2010), 224438.
- [81] K. Nagata and Y. Tazuke, *Short range order effects on EPR frequencies in Heisenberg linear chain antiferromagnets*, J. Phys. Soc. Jpn. **32** (1972), 337–345.
- [82] S. E. Nagler, W. J. L. Buyers, R. L. Armstrong, and B. Briat, *Ising-like spin- $\frac{1}{2}$ quasi-one-dimensional antiferromagnets: Spin-wave response in CsCoX₃ salts*, Phys. Rev. B **27** (1983), 1784–1799.

- [83] Y. Natsume, F. Noda, F. Sasagawa, and H. Kanazawa, *Theoretical study of the dynamic effect caused by low-symmetric distribution of spins on EPR spectra in one-dimensional systems by the method of memory function*, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983), 1427–1433.
- [84] A. Ogasahara and S. Miyashita, *Frequency dependence of electron spin resonance*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **145** (2002), 286–289.
- [85] ———, *ESR line shape in strongly interacting spin systems*, J. Phys. Soc. Jpn., Suppl. B **72** (2003), 44–52.
- [86] M. Oshikawa, *ESR in antiferromagnetic chains: a field-theory approach*, J. Phys. Soc. Jpn., Suppl. B **72** (2003), 36–43.
- [87] M. Oshikawa and I. Affleck, *Field-induced gap in $S = 1/2$ antiferromagnetic chains*, Phys. Rev. Lett. **79** (1997), 2883–2886.
- [88] ———, *Low-temperature electron spin resonance theory for half-integer spin antiferromagnetic chains*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999), 5136–5139.
- [89] M. Oshikawa and I. Affleck, *Electron spin resonance in $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic chains*, Phys. Rev. B **65** (2002), 134410, Erratum: *ibid.* **76** (2007) 109901.
- [90] M. Ozerov, A. A. Zvyagin, E. Čížmár, J. Wosnitza, R. Feyerherm, F. Xiao, C. P. Landee, and S. A. Zvyagin, *Spin dynamics in $s = \frac{1}{2}$ chains with next-nearest-neighbor exchange interactions*, Phys. Rev. B **82** (2010), 014416.
- [91] G. F. Reiter and J. P. Boucher, *Theory of exchange narrowing in one and two dimensions*, Phys. Rev. B **11** (1975), 1823–1829.
- [92] J. Sato, B. Aufgebauer, H. Boos, F. Göhmann, A. Klümper, M. Takahashi, and C. Trippe, *Computation of static Heisenberg-chain correlators: Control over length and temperature dependence*, Phys. Rev. Lett. **106** (2011), 257201.
- [93] J. Sato, M. Shiroishi, and M. Takahashi, *Evaluation of dynamic spin structure factor for the spin-1/2 XXZ chain in a magnetic field*, J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004), 3008.
- [94] H. J. Schulz, *Phase diagrams and correlation exponents for quantum spin chains of arbitrary spin quantum number*, Phys. Rev. B **34** (1986), 6372–6385.
- [95] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, 2. ed., Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [96] M. Takahashi, *Numerical calculation of thermodynamic quantities of spin-1/2 anisotropic Heisenberg ring*, Prog. Theor. Phys. **51** (1974), 1348–1354.
- [97] M. Takahashi, G. Kato, and M. Shiroishi, *Next nearest-neighbor correlation functions of the spin-1/2 XXZ chain at massive region*, J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004), 245.
- [98] D. A. Tennant, R. A. Cowley, S. E. Nagler, and A. M. Tsvelik, *Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional KCuF_3 using neutron scattering*, Phys. Rev. B **52** (1995), 13368–13380.

- [99] D. A. Tennant, S. E. Nagler, D. Welz, G. Shirane, and K. Yamada, *Effects of coupling between chains on the magnetic excitation spectrum of KCuF_3* , Phys. Rev. B **52** (1995), 13381–13389.
- [100] D. A. Tennant, T. G. Perring, R. A. Cowley, and S. E. Nagler, *Unbound spinons in the $s = 1/2$ antiferromagnetic chain KCuF_3* , Phys. Rev. Lett. **70** (1993), 4003–4006.
- [101] M. Toda, R. Kubo, and N. Saito, *Statistical Physics I – Equilibrium Statistical Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- [102] C. Trippe, *Ein neuer Zugang zum Sine-Gordon-Modell und Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette*, Ph.D. thesis, Bergische Universität Wuppertal, 2010.
- [103] C. Trippe, F. Göhmann, and A. Klümper, *Short-distance thermal correlations in the massive XXZ chain*, Eur. Phys. J. B **73** (2010), 253.
- [104] T. Typek and N. Guskos, *Magnetic low dimensional effects in $(\text{Dy}_{0.375}\text{Y}_{0.625})_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ studied by ESR spectroscopy*, Rev. Adv. Mater. Sci. **12** (2006), 106.
- [105] J. H. van Vleck, *On the theory of antiferromagnetism*, J. Chem. Phys. **9** (1941), 85.
- [106] _____, *The dipolar broadening of magnetic resonance lines in crystals*, Phys. Rev. **74** (1948), 1168.
- [107] A. N. Vasil'ev, L. A. Ponomarenko, H. Manaka, I. Yamada, M. Isobe, and Y. Ueda, *Magnetic and resonant properties of quasi-one-dimensional antiferromagnet LiCuVO_4* , Phys. Rev. B **64** (2001), 024419.
- [108] J. A. M. Vermaseren, *New features of FORM*, preprint, arXiv:math-ph/0010025, 2000.
- [109] A. Weiße, *Chebyshev expansion approach to the AC conductivity of the Anderson model*, Eur. Phys. J. B **40** (2004), 125.
- [110] A. Weiße and H. Fehske, *Chebyshev expansion techniques*, Computational Many-Particle Physics (Holger Fehske, Ralf Schneider, and Alexander Weiße, eds.), vol. 739, Springer, 2008.
- [111] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, and H. Fehske, *The kernel polynomial method*, Rev. Mod. Phys. **78** (2006), 275–306.
- [112] T. Williams, C. Kelley, and many others, *Gnuplot 4.4: an interactive plotting program*, <http://gnuplot.sourceforge.net/>, March 2011.
- [113] C. N. Yang and C. P. Yang, *One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. III. Applications*, Phys. Rev. **151** (1966), 258.
- [114] H. Yoshizawa, K. Hirakawa, S. K. Satija, and G. Shirane, *Dynamical correlation functions in a one-dimensional Ising-like antiferromagnetic CsCoCl_3 : A neutron scattering study*, Phys. Rev. B **23** (1981), 2298–2307.
- [115] H. Yoshizawa, G. Shirane, H. Shiba, and K. Hirakawa, *Neutron scattering study of a one-dimensional XY antiferromagnet Cs_2CoCl_4* , Phys. Rev. B **28** (1983), 3904–3908.
- [116] Y. Zavoisky, *Spin-magnetic resonance in paramagnetics*, J. Phys. USSR **9** (1945), 211.

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt in erster Linie Herrn Prof. Dr. Andreas Klümper für die hervorragende Betreuung, seine Unterstützung und viele hilfreiche Anregungen und Diskussionen.

Ebenso danke ich Herrn Priv.-Doz. Dr. Frank Göhmann für die hervorragende Betreuung. Er hat diese Arbeit mit angestoßen und mich dabei stets intensiv begleitet. Seine Anregungen in vielen Diskussionen waren sehr wertvoll.

Spezieller Dank gilt auch Herrn Dr. Alexander Weiße, der mir seine Programme zur Dichtematrix und zur numerischen Berechnung der Spektralfunktion zur Verfügung gestellt und mit vielen hilfreichen Vorschlägen zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat.

Weiter danke ich Herrn Priv.-Doz. Dr. Michael Karbach für ausführliche Diskussionen im Zusammenhang mit den Zwei-Spinonen-Rechnungen.

Außerdem möchte ich mich bei den Herren Prof. Dr. Hartwin Bomsdorf, Prof. Dr. Jean-Sébastien Caux, Prof. Dr. Reinhard Kremer, Dr. Yoshitaka Maeda, Prof. Dr. Seiji Miyashita, Prof. Dr. Masaki Oshikawa, Dr. Kazumitsu Sakai und Prof. Dr. Joachim Stolze für ihr reges Interesse und die zahlreichen Diskussionen bedanken.

Weiterhin danke ich der gesamten Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Klümper für die freundliche und freundschaftliche Atmosphäre.

Besonderer Dank gilt Herrn Dipl.-Phys. Win Nuding, Herrn Dipl.-Phys. Dominic Nawrath und Frau Dr. Britta Aufgebauer für viele hilfreiche Diskussionen und das sorgfältige Korrekturlesen dieser Arbeit.

Auch möchte ich mich bei Herrn Dr. Jens Damerau und Herrn Dr. Christian Trippe für ihre Programme zur Lösung der nichtlinearen Integralgleichungen bedanken, die ich nur für meine Zwecke erweitern und nicht neu entwickeln musste.

Besonders bedanke ich mich bei meiner Freundin Britta für ihre liebevolle Unterstützung, ihre Geduld und ihr Verständnis in dieser arbeitsreichen Zeit sowie für hilfreiche Diskussionen über die in der Arbeit verwendeten Methoden der Statistik.

Weiterer Dank gilt meiner Familie und meinen Freunden, die mich stets unterstützt haben.

Für die finanzielle Unterstützung durch das DFG-Graduiertenkolleg „Darstellungstheorie und ihre Anwendungen in Mathematik und Physik“ sowie durch die Volkswagen Stiftung bin ich dankbar.