Zur Dynamik von klassischen Heisenberg-Systemen:

Klassen integrabler Systeme

und

symplektische Integratoren für nicht integrable Systeme

Diplomarbeit

Robin Steinigeweg

Fachbereich Physik
Universität Osnabrück

April 2005

Inhaltsverzeichnis

Bezeichnungen

$\mathbb{N}$	Menge der natürlichen Zahlen
$\mathbb{Z}$	Menge der ganzen Zahlen
$\mathbb{Q}$	Menge der rationalen Zahlen
$\mathbb{R}$	Menge der reellen Zahlen
H	Hamilton-Funktion
E	Erhaltungsgröße
V	Vektorfeld
$\mathcal{F}$	Fluss
f	Abbildung
$\mathcal{P}$	Phasenraum
n	Zahl der Freiheitsgrade in einem Hamiltonschen System
N	Zahl der klassischen Spins
t	Zeit
$\vec{s} = (s^1, s^2, s^3)$	klassischer Spin
$\vec{S} = (S^{(1)}, S^{(2)}, S^{(3)})$	klassischer Gesamtspin
$\{\ ,\ \}$	Poisson-Klammer
$\mathbb{I}$	Einheitsmatrix
$\mathbb{J}$	Kopplungsmatrix
$\mathbb{D}$	Drehmatrix
$\vec{\omega}$	Drehachse
$\vec{B}$	Magnetfeld
$\vec{C}, c$	Konstante
$\mu, \nu, \lambda, \kappa$	Indizes
A, B, M	Mengen von Indizes
M_E	Kantenmenge
M_V	Knotenmenge
$\mathcal{B}$	Baum
Λ	Ljapunov-Exponent
^{T}	transponiert
$\|\|.\|\|$	Norm
g	metrischer Tensor
φ, ϑ	Winkel

1 Einleitung

In den letzten Jahren ist die gezielte Synthese einer Vielzahl magnetischer Moleküle gelungen, in denen nur wenige paramagnetische Ionen ("Spins") miteinander wechselwirken. Die chemische Struktur dieser Moleküle erlaubt es, die magnetischen Eigenschaften *einzelner* Moleküle zu beobachten: Die paramagnetischen Ionen sind in eine organische Matrix eingebettet und von großen Liganden-Komplexen umgeben, so dass die Wechselwirkung zwischen benachbarten Molekülen vernachlässigbar gering ist. Durch die Messung an einer makroskopischen Probe wie einem Pulver oder einem Kristall werden daher die magnetischen Eigenschaften eines Ensembles wechselwirkungsfreier identischer Moleküle erfasst.

Magnetische Moleküle stellen nicht nur nahezu ideale "Laborsysteme" dar, um grundlegende Fragen zum Magnetismus zu untersuchen, sondern eignen sich auch für viele Anwendungen in der Nanotechnologie, die oftmals als Schlüsseltechnolgie des 21. Jahrhunderts gefeiert wird. Umso wichtiger ist es, geeignete theoretische Modelle und Simulationsverfahren zu entwickeln, mit denen sich magnetische Moleküleigenschaften beschreiben und vor allem voraussagen lassen.

Obwohl der Ursprung magnetischer Eigenschaften in der Quantenmechanik verwurzelt ist, liefern *klassische* Spin-Modelle erstaunlich gute Ergebnisse. So sind mit Hilfe des klassischen Heisenberg-Modells statische Eigenschaften wie die magnetische Suszeptibilität oder die spezifische Wärme berechnet worden, die selbst für kleinste Moleküle in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten stehen [1] [2]. Auch wenn die klassische Beschreibung bestimmten Grenzen unterliegt, so stellt diese Beschreibungsweise in vielen Fällen die derzeit einzige Möglichkeit dar, überhaupt Aussagen über statische oder dynamische Eigenschaften zu machen [1].

Die Neutronenstreuung gilt bis heute als die vielseitigste Methode für die Untersuchung magnetischer Materialien. Da der Neutronenstreuquerschnitt eng mit der dynamischen Spin-Spin-Korrelationsfunktion verknüpft ist, spielt die *Dynamik* von klassischen Spin-Modellen eine wichtige Rolle [1] [2].

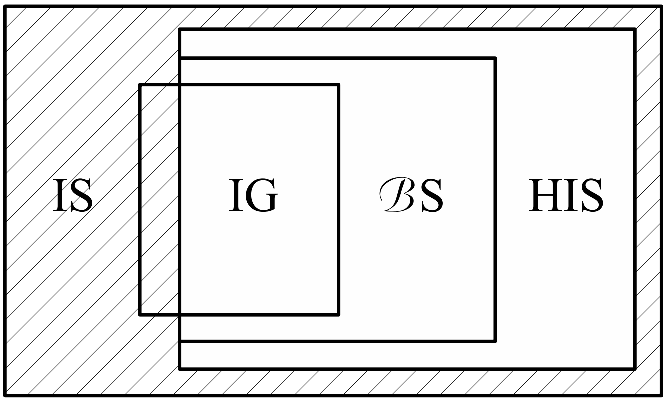
Ein System von N klassischen Spins stellt ein Hamiltonsches System mit einem $2\,N$-dimensionalen Phasenraum (mit N "Freiheitsgraden") dar. Für ein solches System ist der Begriff "integrabel" über den Liouvilleschen Satz definiert, nach dem in integrablen Systemen N unabhängige und – im Sinne der Poisson-Klammer – vertauschbare Erhaltungsgrößen existieren [3]. Für integrable Systeme lassen sich sogenannte Wirkungs- und Winkelvariablen I_μ und φ_μ finden, so dass

$$\dot{I}_\mu = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_\mu} = 0 \quad \text{und} \quad \dot{\varphi}_\mu = \frac{\partial H}{\partial I_\mu} = \omega_\mu = \text{const.} \quad \text{für } \mu = 1, \ldots, N. \tag{1}$$

Deswegen sind die Bewegungsgleichungen eines integrablen Systems explizit lösbar, sofern sich die Integrationen ausführen lassen, die für die Definition dieser Variablen notwendig sind [3].
Da integrable Systeme vergleichsweise selten sind, ist es wichtig, möglichst viele Beispiele zu finden, um Vermutungen über größere Systemklassen wie die nicht integrablen Systeme überprüfen zu können. Die Charakterisierung der Klasse $\mathcal{IS}$ aller integrablen Spin-Systeme stellt sich als schwer heraus und ist nach wie vor ein ungelöstes Problem. Dies motiviert die Suche nach Klassen von integrablen Spin-Systemen und Kriterien für Integrabilität. Ein Großteil der veröffentlichten Arbeiten beschäftigt sich lediglich mit speziellen Beispielen und numerischen Fallstudien [4] [5].
In dieser Arbeit wird ebenfalls keine Charakterisierung der Klasse $\mathcal{IS}$ aller integrablen Spin-Systeme vorgenommen, sondern eine spezielle Unterklasse $\mathcal{HIS} \subset \mathcal{IS}$ untersucht, die Klasse der "Heisenberg-integrablen Systeme". Diese Systeme sind durch die zusätzliche Bedingung definiert, dass $N-1$ der insgesamt N unabhängigen, vertauschbaren Erhaltungsgrößen sowie die Hamilton-Funktion H selbst vom Heisenberg-Typ sind, d.h. sie lassen sich als Linearkombination von Skalarprodukten der klassischen Spin-Vektoren darstellen.

$$E_i = \sum_{\mu < \nu}^{N} E_{i,\,\mu\nu}\; \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \quad \text{für } i = 1, \ldots, N-1 \tag{2}$$

Für die verbleibende N-te Erhaltungsgröße wird eine der drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ gewählt, üblicherweise die Komponente $S^{(3)}$.
Der sogenannte Ljapunov-Exponent ermöglicht numerische Untersuchungen, durch die sich mit hoher Sicherheit chaotisches Verhalten nachweisen und somit die Integrabilität eines Systems ausschließen lässt [1]. In dieser Arbeit werden für eine Auswahl von kleinen Spin-Systemen numerische Rechnungen durchgeführt, die zu der begründeten Vermutung führen, dass $\mathcal{HIS} = \mathcal{IS}$ ist, wenn H vom Heisenberg-Typ ist.
Ein weiteres Ergebnis dieser Arbeit ist die Aussage, dass jedes Teilsystem eines Heisenberg-integrablen Spin-Systems wieder Heisenberg-integrabel ist. Trotz dieser Aussage gelingt keine Charakterisierung der Klasse $\mathcal{HIS}$ selbst, aber von zwei speziellen Unterklassen $\mathcal{HIG} \subset \mathcal{BS} \subset \mathcal{HIS}$, die Klasse der Heisenberg-integrablen "Spin-Graphen" und die Klasse derjenigen Systeme, die über einen "Konstruktionsbaum" $\mathcal{B}$ verfügen.



Ein Spin-Graph wird über eine Hamilton-Funktion

$$H = \sum_{\mu < \nu}^{N} J_{\mu\nu} \, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \tag{3}$$

mit $J_{\mu\nu} \in \{0, 1\}$ beschrieben. Offensichtlich lässt sich das Kopplungsschema eines solchen Systems durch einen ungerichteten Graphen darstellen, dessen Knoten die N Spins und dessen Kanten diejenigen Spinpaare mit $J_{\mu\nu} = 1$ repräsentieren.

Bis auf die Ausnahme der 4er-Kette sind alle Spin-Graphen mit $N \leq 4$ Heisenberg-integrabel. Wie sich herausstellt, ist ein Spin-Graph genau dann Heisenberg-integrabel, wenn der Spin-Graph keine 4er-Kette als Teilsystem enthält. Diese Bedingung ist nur dann erfüllt, wenn sich der Spin-Graph in zwei Teilsysteme zerlegen lässt, die entweder gleichförmig gekoppelt oder nicht gekoppelt sind. Da die beiden Teilsysteme wieder Heisenberg-integrabel sind, ist eine rekursive Anwendung der Zerlegung möglich, so dass sich der gesamte Spin-Graph in immer kleinere Heisenberg-integrable Teilsysteme mit gleichförmiger oder keiner Kopplung zerlegen lässt. Eine geeignete Kodierung dieser Abfolge von Zerlegungen ermöglicht ein "binärer Teilmengenbaum", der Konstruktionsbaum $\mathcal{B}$. Die Aufhebung der Einschränkung $J_{\mu\nu} \in \{0, 1\}$ führt auf die allgemeinere Klasse derjenigen Systeme, die über einen solchen Konstruktionsbaum $\mathcal{B}$ verfügen. Obwohl bekannt ist, dass die gleichförmige Kopplung von zwei integrablen Systemen wieder integrabel ist [5], scheint die Verwendung von Konstruktionsbäumen eine neue Methode zu sein, mit der erstmals die explizite Angabe der Zeitentwicklung gelingt.

Als ein Beispiel für mögliche Anwendungen wird in dieser Arbeit ein neues numerisches Verfahren für nicht integrable Spin-Systeme vorgestellt, die eine Hamilton-Funktion H vom Heisenberg-Typ haben. Dieses Verfahren ist ein

sogenannter symplektischer Integrator und nutzt aus, dass H aus Anteilen besteht, die Heisenberg-integrable Systeme aus der Klasse $\mathcal{BS}$ beschreiben. Für diese Systeme erlaubt die Verwendung von Konstruktionsbäumen sowohl die explizite Angabe als auch die exakte Berechnung der Zeitentwicklungen, die symplektische Transformationen auf dem Phasenraum darstellen. Mit Hilfe dieser Transformationen kann – auf der Grundlage von sogenannten Suzuki-Trotter-Zerlegungen [6] – die unbekannte Zeitentwicklung des nicht integrablen Spin-Systems approximiert werden.
Die Motivation für die Entwicklung des numerischen Verfahrens liefert die Feststellung, dass die Erhaltung der symplektischen Struktur nicht nur zu einem verbesserten qualitativen Verhalten, sondern auch zu einem deutlich genaueren Langzeitverhalten führt als mit den üblichen Standardmethoden wie dem Runge-Kutta-Verfahren [6] [7]. Die Effektivität und Effizienz von symplektischen Methoden konnte anhand von Simulationen für verschiedene Fragestellungen aus Bereichen wie der Astronomie, der Mechanik oder der Molekulardynamik bestätigt werden.
Das in dieser Arbeit vorgestellte numerische Verfahren gewährleistet nicht nur die Erhaltung der symplektischen Struktur sondern auch die Konstanz von typischen Erhaltungsgrößen wie zum Beispiel den Phasenraum-Volumina, den Beträgen der Einzelspins und den drei Komponenten des Gesamtspins. Obwohl die Gesamtenergie in der Regel nicht exakt erhalten ist, zeigt sich in den durchgeführten Rechnungen im Gegensatz zum Runge-Kutta-Verfahren keine systematische Drift, sondern nur eine beschränkte Fluktuation um die Anfangsenergie. Der Vergleich der numerischen mit der analytischen Lösung von Heisenberg-integrablen Systemen bestätigt die sehr hohe Genauigkeit des Verfahrens und die Eignung für große Zeitschritte, die zu einer kurzen Rechenzeit führen.

2 Grundlagen

Phasenraum

Der Zustand von N klassischen Spins lässt sich durch ein N-Tupel der Form $s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N)$ mit $\vec{s}_\mu \in \mathbb{R}^3$ und $|\vec{s}_\mu| = 1$ für $\mu = 1, \ldots, N$ beschreiben. Die Menge aller möglichen Zustände bildet den *Phasenraum* $\mathcal{P}$ eines klassischen N-Spin-Systems.

$$\mathcal{P} = \{s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N) \,\text{mit}\, \vec{s}_\mu \in \mathbb{R}^3 \,\text{und}\, |\vec{s}_\mu| = 1 \,\text{für}\, \mu = 1, \ldots, N\} \tag{4}$$

Der $2N$-dimensionale Phasenraum $\mathcal{P}$ ist eine kompakte Mannigfaltigkeit [4] und der Produktraum von N Einheitskugeln: $\mathcal{P} = (\mathcal{S}^2)^N$.

Poisson-Klammer

Die Komponenten s_μ^i $(i = 1, 2, 3)$ der klassischen Spins $\vec{s}_\mu$ $(\mu = 1, \ldots, N)$ stellen Funktionen auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$ dar.

$$s_\mu^i : \mathcal{P} \to \mathbb{R} \tag{5}$$

Über die *Lie-Poisson-Klammer* für zwei (glatte) Funktionen $f, g : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ wird die symplektische Struktur des Phasenraumes $\mathcal{P}$ definiert [1].

$$\{f(s), g(s)\} = \sum_{\mu=1}^{N} \epsilon_{ijk} \frac{\partial f}{\partial s_\mu^i} \frac{\partial g}{\partial s_\mu^j} s_\mu^k \tag{6}$$

Gemäß der Einsteinschen Summenkonvention wird über die Indizes i, j, k summiert. ϵ_{ijk} bezeichnet den total antisymmetrischen *Levi-Civita-Tensor*.

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{falls } (i,j,k) \text{ eine gerade Permutation von } (1,2,3) \\ -1, & \text{falls } (i,j,k) \text{ eine ungerade Permutation von } (1,2,3) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{7}$$

Zunächst betrachten wir Gleichung (6) für den Fall $f(s) = s_\mu^i$ und $g(s) = s_\nu^j$.

$$\{s_\mu^i, s_\nu^j\} = \sum_{\lambda=1}^{N} \epsilon_{lmk} \frac{\partial s_\mu^i}{\partial s_\lambda^l} \frac{\partial s_\nu^j}{\partial s_\lambda^m} s_\lambda^k \tag{8 a}$$

$$= \sum_{\lambda=1}^{N} \epsilon_{lmk}\, \delta_{li}\, \delta_{\lambda\mu}\, \delta_{mj}\, \delta_{\lambda\nu}\, s_\lambda^k \tag{8 b}$$

$$= \epsilon_{ijk}\, \delta_{\mu\nu}\, s_\mu^k \tag{8 c}$$

$\delta_{\mu\nu}$ bezeichnet das *Kronecker-Symbol.*

$$\delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & \text{falls } \mu = \nu \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{9}$$

Vektorfeld

Nun betrachten wir Gleichung (6) für den Fall $f(s) = s_\mu^i$ und $g(s)$ beliebig.

$$\begin{aligned} \{s_\mu^i, g(s)\} &= \sum_{\lambda=1}^{N} \epsilon_{ljk}\, \frac{\partial s_\mu^i}{\partial s_\lambda^l}\, \frac{\partial g}{\partial s_\lambda^j}\, s_\lambda^k && \text{(10 a)} \\ &= \sum_{\lambda=1}^{N} \epsilon_{ljk}\, \delta_{li}\, \delta_{\lambda\mu}\, \frac{\partial g}{\partial s_\lambda^j}\, s_\lambda^k && \text{(10 b)} \\ &= \epsilon_{ijk}\, \frac{\partial g}{\partial s_\mu^j}\, s_\mu^k && \text{(10 c)} \end{aligned}$$

Aufgrund der Beziehung $(\vec{a} \times \vec{b})^i = \epsilon_{ijk}\, a^j\, b^k$ gilt

$$\{s_\mu^i, g(s)\} = \left(\frac{\partial g}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu \right)^i . \tag{11}$$

Zu jeder (glatten) Funktion $g : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ gibt es also ein *Vektorfeld* V^g auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$. Dieses Vektorfeld ist ein N-Tupel mit den Elementen

$$\begin{aligned} V_\mu^g &= \{\vec{s}_\mu, g(s)\} = \frac{\partial g}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu && \text{(12 a)} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\partial g \,/\, \partial s_\mu^3 & \partial g \,/\, \partial s_\mu^2 \\ \partial g \,/\, \partial s_\mu^3 & 0 & -\partial g \,/\, \partial s_\mu^1 \\ -\partial g \,/\, \partial s_\mu^2 & \partial g \,/\, \partial s_\mu^1 & 0 \end{pmatrix} \vec{s}_\mu && \text{(12 b)} \\ &\equiv \mathbb{V}_\mu^g\, \vec{s}_\mu . && \text{(12 c)} \end{aligned}$$

Das Vektorfeld V^g ist vollständig, da der Phasenraum $\mathcal{P}$ kompakt ist [8].

Bewegungsgleichung

Ist $H : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ die Hamilton-Funktion eines klassischen Spin-Systems, so wird die Zeitentwicklung einer Funktion $f : \mathcal{P} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ über

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \tag{13}$$

beschrieben [4]. Wenn f nicht explizit von der Zeit t abhängig ist, dann gilt $\partial f \,/\, \partial t = 0$ und folglich

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}. \tag{14}$$

Somit ist die Gesamtenergie konstant: $dH \,/\, dt = \{H, H\} = 0$.
Wählen wir $f(s) = s^i_\mu$, so erhalten wir mit Hilfe von Gleichung (11) und (14) die *Bewegungsgleichung*

$$\dot{\vec{s}}_\mu = \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu, \tag{15}$$

die eine Präzession des μ-ten Spins um das – durch die Wechselwirkung H erzeugte – lokale Feld $\vec{h}_\mu = \partial H \,/\, \partial \vec{s}_\mu$ beschreibt [1]. Im allgemeinen ist das lokale Feld $\vec{h}_\mu$ nicht konstant und der momentane Wert von $\vec{h}_\mu$ hängt von denjenigen Spins $\vec{s}_\nu$ ab, die mit dem Spin $\vec{s}_\mu$ wechselwirken. Die Struktur der Bewegungsgleichung gewährleistet, dass der Betrag $|\vec{s}_\mu|$ erhalten bleibt.

Fluss

Diese insgesamt N Bewegungsgleichungen bilden ein endlichdimensionales System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung.

$$\dot{s} = V^H = \mathbb{V}^H s \quad \text{mit} \quad \mathbb{V}^H = \begin{pmatrix} \mathbb{V}^H_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mathbb{V}^H_N \end{pmatrix} \tag{16}$$

Die formale Lösung lautet

$$s(t) = \mathcal{F}^H_t \, s_0 \quad \text{mit} \quad s_0 = s(0). \tag{17}$$

Der *Fluss* $\mathcal{F}^H_t : \mathcal{P} \to \mathcal{P}$ beschreibt die Zeitentwicklung für alle Punkte s_0 im Phasenraum $\mathcal{P}$ und ist definiert für alle Zeiten t, weil das Vektorfeld

V^H vollständig ist. Die Flüsse $\mathcal{F}_t^f$ und $\mathcal{F}_t^g$ von zwei (glatten) Funktionen $f, g : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ kommutieren genau dann, wenn $\{f, g\} = 0$ [9].

Kanonische Koordinaten

Anstelle der klassischen Spins $\vec{s}_\mu$ ($\mu = 1, \ldots, N$) lassen sich die *kanonischen Koordinaten* $(q_\mu, p_\mu) = (\varphi_\mu, z_\mu)$ mit $\varphi_\mu \in [0, 2\,\pi]$ und $z_\mu \in [-1, 1]$ verwenden. Es gilt

$$\vec{s}_\mu = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - z_\mu^2}\,\cos\varphi_\mu \\ \sqrt{1 - z_\mu^2}\,\sin\varphi_\mu \\ z_\mu \end{pmatrix}. \tag{18}$$

In den kanonischen Orten $q = \varphi = (\varphi_1, \ldots, \varphi_N)$ und in den kanonischen Impulsen $p = z = (z_1, \ldots, z_N)$ hat die Poisson-Klammer von zwei (glatten) Funktionen $g, f : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ die Form [4]

$$\{f(\varphi, z), g(\varphi, z)\} = \sum_{\mu=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial \varphi_\mu}\frac{\partial g}{\partial z_\mu} - \frac{\partial g}{\partial \varphi_\mu}\frac{\partial f}{\partial z_\mu}. \tag{19}$$

Insbesondere ist $\{\varphi_\mu, \varphi_\nu\} = \{z_\mu, z_\nu\} = 0$ und $\{\varphi_\mu, z_\nu\} = \delta_{\mu\nu}$. Es gelten die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\varphi}_\mu = \{\varphi_\mu, H(\varphi, z)\} = \frac{\partial H}{\partial z_\mu} \quad \text{und} \quad \dot{z}_\mu = \{z_\mu, H(\varphi, z)\} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_\mu}. \tag{20}$$

Wie die kanonischen Koordinaten deutlich machen, besitzt ein klassisches N-Spin-System N "Freiheitsgrade".

Heisenberg-Modell

In der klassischen Mechanik besteht die Hamilton-Funktion H in der Regel aus einem Anteil, der nur die kanonischen Impulse enthält, und aus einem Anteil, der nur die kanonischen Orte enthält: $H = T(p) + U(q)$. Allerdings eignet sich eine Hamilton-Funktion dieser Form nicht für die Modellierung von klassischen Spin-Systemen.
Im *Heisenberg-Modell* wird die Wechselwirkung zwischen zwei Spins $\vec{s}_\mu$ und $\vec{s}_\nu$ durch ein Skalarprodukt der Form $J_{\mu\,\nu}\,\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu$ vermittelt, wobei die (reelle) Kopplungskonstante $J_{\mu\,\nu}$ die Stärke der Wechselwirkung festlegt.

$$H = \sum_{\mu\,<\,\nu}^{N} J_{\mu\,\nu}\,\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \tag{21 a}$$

$$= \sum_{\mu<\nu}^{N} J_{\mu\nu} \left(\sqrt{(1-z_\mu^2)(1-z_\nu^2)} \, \cos(\varphi_\mu - \varphi_\nu) + z_\mu z_\nu \right) \qquad (21\text{ b})$$

Gesamtspin

Da im Heisenberg-Modell die Hamilton-Funktion H rotationsinvariant ist, sind die Komponenten $S^{(i)}$ $(i = 1, 2, 3)$ des *Gesamtspins*

$$\vec{S} = \sum_{\mu=1}^{N} \vec{s}_\mu \qquad (22)$$

und somit das Quadrat $S^2 = \vec{S} \cdot \vec{S}$ erhalten [4]. Obwohl die Poisson-Klammer zwischen zwei Komponenten $S^{(i)}$ und $S^{(j)}$ nicht verschwindet

$$\{S^{(i)}, S^{(j)}\} = \epsilon_{ijk} \, S^{(k)}, \qquad (23)$$

sind eine Komponente und das Quadrat des Gesamtspins $\vec{S}$ zwei – im Sinne der Poisson-Klammer – *vertauschbare Erhaltungsgrößen*

$$\{S^{(i)}, H\} = \{S^2, H\} = \{S^{(i)}, S^2\} = 0. \qquad (24)$$

3 Integrabilität von Heisenberg-Systemen

3.1 Definitionen

Definition *Ein System von N klassischen Spins $\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N$, beschrieben über eine Hamilton-Funktion $H : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ der Form*

$$H = \sum_{\mu < \nu}^{N} J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \tag{25 a}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mu,\,\nu=1}^{N} J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \quad \text{mit } J_{\mu\nu} \in \mathbb{R},\ J_{\mu\nu} = J_{\nu\mu} \text{ und } J_{\mu\mu} = 0, \tag{25 b}$$

heißt Heisenberg-System*. Wir sagen: H ist ein klassisches Heisenberg-System. Sind zusätzlich alle $J_{\mu\nu} \in \{0, 1\}$, dann heißt H* Heisenberg-Graph.

Im Heisenberg-Modell können wir ein klassisches Spin-System vollständig durch die Kopplungsmatrix $\mathbb{J}$ beschreiben. Diese Matrix ist in der Regel durch die Hamilton-Funktion H gegeben. Aus diesem Grund können wir das System mit der Hamilton-Funktion H identifizieren. Wenn das System jedoch einen Spin enthält, der keine Wechselwirkung mit den anderen Spins eingeht, so können wir diesen Spin entfernen, ohne dass sich die Hamilton-Funktion H verändert. Durch die zusätzliche Angabe des Phasenraumes $\mathcal{P}$ können wir dieses Problem gegebenenfalls vermeiden.
In vielen Fällen ist es nützlich, ein klassisches Heisenberg-System durch einen ungerichteten Graphen darzustellen. In dieser Darstellung werden die Spins durch die Knotenmenge M_V und die Wechselwirkung zwischen den Spins durch die Kantenmenge M_E des Graphen beschrieben. Die Kopplungsmatrix $\mathbb{J}$ ist die Adjazensmatrix des Graphen. Auf diese Art und Weise stehen uns die Methoden der Graphentheorie zur Verfügung.
Für einige Fragestellungen ist es sinnvoll, ein klassisches Heisenberg-System zu zerlegen und Eigenschaften des Gesamtsystems aus den Eigenschaften der Teilsysteme abzuleiten. Dabei ist die Kopplung zwischen den Teilsystemen entscheidend.

Definition *H sei ein klassisches Heisenberg-System. H_A heißt* Teilsystem *von H oder* Einschränkung *von H auf A, wenn*

$$H_A = \sum_{\substack{\mu < \nu \\ \mu,\, \nu \in A}} J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \quad \text{mit } A \subseteq \{1, \ldots, N\}. \tag{26}$$

Zwei Teilsysteme H_A und H_B sind getrennt*, wenn $A \cap B = \emptyset$. Gilt $A, B \neq \emptyset$*

und $A \cup B = \{1, \dots, N\}$*, dann sind* H_A *und* H_B *eine* Zerlegung *von* H*.*

$$H_{AB} = \sum_{\substack{\mu < \nu \\ \mu \in A,\, \nu \in B}} J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu \tag{27}$$

ist die Kopplung zwischen den Teilsystemen H_A *und* H_B*. Die Kopplung ist* vollständig*, wenn* $J_{\mu\nu} \neq 0$ *für alle* $\mu \in A$ *und* $\nu \in B$*. Sind zusätzlich alle* $J_{\mu\nu} = c \in \mathbb{R}$*, dann ist die Kopplung* gleichförmig*. Ist* $H_{AB} = 0$*, dann sind* H_A *und* H_B *ungekoppelt. Das Gesamtsystem*

$$H = H_A + H_B + H_{AB} \tag{28}$$

ist zusammenhängend*, wenn es keine ungekoppelte Zerlegung gibt.*

3.2 Liouvillescher Satz über integrable Systeme

Nach Aussage des Liouvilleschen Satzes ist ein Hamiltonsches System mit einem $2\,n$-dimensionalen Phasenraum (mit n "Freiheitsgraden") integrabel, wenn es n unabhängige Erhaltungsgrößen E_i mit

$$\{H, E_i\} = \{E_i, E_j\} = 0 \tag{29}$$

für alle $i, j = 1, \dots, n$ gibt [3, S. 271 f].
Aus diesem Grund ist ein System von N klassischen Spins integrabel, wenn es N unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen gibt [4]. In integrablen Spin-Systemen sind alle Phasenraum-Trajektorien regulär. Wenn allerdings weniger als N unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen existieren, dann sind chaotische Trajektorien möglich. [1]
In autonomen Systemen ist die Hamilton-Funktion H eine Erhaltungsgröße. Deswegen lässt sich in klassischen Heisenberg-Systemen $E_1 = H$ wählen. Um entscheiden zu können, ob ein System integrabel ist, benötigen wir jedoch weitere $N - 1$ Erhaltungsgrößen, die mit H und untereinander vertauschen. Zunächst suchen wir diese Erhaltungsgrößen unter den Funktionen erster und zweiter Ordnung. Diese Funktionen sind linear bzw. quadratisch in den Komponenten s^i_μ der Einzelspins $\vec{s}_\mu$ und werden in den folgenden Abschnitten genau definiert.
In unseren Überlegungen können wir uns auf zusammenhängende Systeme beschränken. Wenn ein System nicht zusammenhängend ist, dann besteht

[1] siehe Abschnitt "Ljapunov-Exponent"

dieses aus zusammenhängenden Teilsystemen, die nicht gekoppelt sind. Das Gesamtsystem ist also integrabel, wenn jedes Teilsystem integrabel ist.

3.3 Erhaltungsgrößen 1. Ordnung

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit den Erhaltungsgrößen erster Ordnung. Die Funktionen erster Ordnung sind linear in den Komponenten s_μ^i der Einzelspins $\vec{s}_\mu$. Zu den Funktionen erster Ordnung gehören beispielsweise die drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$.

Definition *Eine Funktion $E : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ der Form*

$$E = \sum_{\mu=1}^{N} \vec{e}_\mu \cdot \vec{s}_\mu \quad \text{mit } \vec{e}_\mu \in \mathbb{R}^3 \tag{30}$$

heißt Funktion erster Ordnung*. Vertauscht E mit der Hamilton-Funktion H des Systems, gilt also $\{E, H\} = 0$, dann heißt E* Erhaltungsgröße erster Ordnung *von H.*

Wie wir bereits wissen, sind die drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ in jedem klassischen Heisenberg-System H erhalten. Jedoch vertauschen diese Erhaltungsgrößen erster Ordnung nicht miteinander. Deswegen bestimmen wir, welche Bedingungen die Koeffizienten $\vec{e}_\mu$ erfüllen müssen, damit zwei Funktionen erster Ordnung sowohl mit der Hamilton-Funktion H als auch miteinander vertauschen.

Lemma 3.1 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Eine Funktion erster Ordnung E ist Erhaltungsgröße von H, wenn die Gleichung*

$$J_{\mu\nu}(\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu) = 0 \tag{31}$$

gilt für alle $\mu < \nu \leq N$. Eine weitere Funktion erster Ordnung F vertauscht mit E, wenn die Gleichung $\vec{e}_\mu \times \vec{f}_\mu = 0$ gilt für alle $\mu \leq N$.

Beweis
Wir betrachten die Poisson-Klammer zwischen der Hamilton-Funktion H und einer Funktion erster Ordnung E.

$$\{E, H\} = \{\sum_{\lambda} \vec{e}_\lambda \cdot \vec{s}_\lambda, \sum_{\mu<\nu} J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu\} \tag{32}$$

$$= \sum_{\lambda} \sum_{\mu < \nu} J_{\mu\nu} \{\vec{e}_\lambda \cdot \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu\} \tag{33}$$

Die Poisson-Klammer zwischen den Skalarprodukten verschwindet, wenn alle Indizes λ, μ und ν verschieden sind.

$$= \sum_{\mu < \nu} J_{\mu\nu} \left(\{\vec{e}_\mu \cdot \vec{s}_\mu, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu\} + \{\vec{e}_\nu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu\}\right) \tag{34}$$

Mit der Beziehung $\{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j, \vec{k} \cdot \vec{s}_j\} = det(\vec{s}_i, \vec{k}, \vec{s}_j)$ können wir diesen Ausdruck weiter umformen. Eine Herleitung dieser Beziehung befindet sich im Anhang.

$$= \sum_{\mu < \nu} J_{\mu\nu} \left(det(\vec{s}_\mu, \vec{e}_\mu, \vec{s}_\nu) + det(\vec{s}_\nu, \vec{e}_\nu, \vec{s}_\mu)\right) \tag{35}$$

Wir können die Determinanten durch Spatprodukte ersetzen und zyklisch vertauschen.

$$= \sum_{\mu < \nu} J_{\mu\nu} \left(\vec{e}_\mu \cdot (\vec{s}_\nu \times \vec{s}_\mu) + \vec{e}_\nu \cdot (\vec{s}_\mu \times \vec{s}_\nu)\right) \tag{36}$$

$$= \sum_{\mu < \nu} J_{\mu\nu} \, (\vec{e}_\nu - \vec{e}_\mu) \cdot (\vec{s}_\mu \times \vec{s}_\nu) \tag{37}$$

Ist E eine Erhaltungsgröße von H, dann verschwindet die Poisson-Klammer. Aufgrund von Lemma A.1 müssen alle Koeffizienten vor den Kreuzprodukten verschwinden und wir erhalten die Gleichung

$$J_{\mu\nu}(\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu) = 0 \tag{38}$$

für alle $\mu < \nu \leq N$.

Wir betrachten nun die Poisson-Klammer von E und einer weiteren Funktion erster Ordnung F.

$$\{E, F\} = \{\sum_{\mu} \vec{e}_\mu \cdot \vec{s}_\mu, \sum_{\nu} \vec{f}_\nu \cdot \vec{s}_\nu\} \tag{39}$$

$$= \sum_{\mu,\nu} \{\vec{e}_\mu \cdot \vec{s}_\mu, \vec{f}_\nu \cdot \vec{s}_\nu\} \tag{40}$$

Die Poisson-Klammer zwischen den Skalarprodukten verschwindet, wenn die Indizes μ und ν verschieden sind. Wir verwenden $\{\vec{k}_1 \cdot \vec{s}_i, \vec{k}_2 \cdot \vec{s}_i\} = det(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{s}_i)$ und erhalten

$$\{E, F\} = \sum_{\mu} (\vec{e}_\mu \times \vec{f}_\mu) \cdot \vec{s}_\mu.^{2} \tag{41}$$

Aufgrund von Lemma A.1 verschwindet die Poisson-Klammer zwischen E und F genau dann, wenn $\vec{e}_\mu \times \vec{f}_\mu = 0$ für alle $\mu \leq N$. □

Zunächst wenden wir das Lemma auf ein bekanntes Beispiel an. Wenn wir mit $\vec{b}_i$ die kartesischen Einheitsvektoren bezeichnen, dann können wir die drei Komponenten des Gesamtspins in der Form $S^{(i)} = \vec{b}_i \cdot \vec{S}$ darstellen. Die Koeffizienten $\vec{e}_\mu = \vec{b}_i$ stimmen also für alle $\mu \leq N$ überein. Deswegen ist die Bedingung $J_{\mu\nu}(\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu) = 0$ für alle $J_{\mu\nu}$ erfüllt. Da die kartesischen Einheitsvektoren linear unabhängig sind, ist die Bedingung $\vec{e}_\mu \times \vec{f}_\mu = 0$ nicht erfüllt. Folglich sind die Komponenten des Gesamtspins in jedem klassischen Heisenberg-System Erhaltungsgrößen erster Ordnung, die nicht miteinander vertauschen.
Für ein System von N ungekoppelten Spins gilt $H = 0$. Deswegen sind die Komponenten der Einzelspins $s_1^3, \ldots, s_N^3$ Erhaltungsgrößen erster Ordnung. Diese N Erhaltungsgrößen sind unabhängig und vertauschen. Das System ist folglich integrabel. Aufgrund des folgenden Satzes ist es jedoch nicht möglich, N unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen erster Ordnung zu finden, sobald zwei Spins eine Wechselwirkung miteinander eingehen.

Satz 3.2 *Wenn ein klassisches Heisenberg-System zusammenhängend ist, dann gibt es keine zwei vertauschbaren Erhaltungsgrößen erster Ordnung, die linear unabhängig sind.*

Beweis
H sei ein klassisches Heisenberg-System und E eine Erhaltungsgröße erster Ordnung von H. Aufgrund von Lemma 3.1 erfüllen die Koeffizienten von E die Gleichung

$$J_{\mu\nu}(\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu) = 0 \tag{42}$$

für alle $\mu < \nu \leq N$. Koppelt der Spin $\vec{s}_\mu$ mit dem Spin $\vec{s}_\nu$, ist also $J_{\mu\nu} \neq 0$,

[2] Die Poisson-Klammer zwischen zwei Funktionen erster Ordnung liefert eine Funktion erster Ordnung.

dann gilt $\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu = 0$ und die beiden Koeffizienten stimmen überein. Wenn H zusammenhängend ist, gilt $\vec{e}_\mu - \vec{e}_\nu = 0$ für alle $\mu < \nu \leq N$ und somit stimmen alle Koeffizienten von E überein.
Aufgrund von Lemma 3.1 vertauscht E mit einer weiteren Erhaltungsgröße erster Ordnung F, wenn die Beziehung $\vec{e}_\mu \times \vec{f}_\mu = 0$ gilt für alle $\mu \leq N$. Deswegen sind der μ-te Koeffizient von E und der μ-te Koeffizient von F linear abhängig. Da alle Koeffizienten von F übereinstimmen, sind E und F linear abhängig. Folglich besitzt H keine zwei unabhängigen, vertauschbaren Erhaltungsgrößen erster Ordnung. $\square$

Aufgrund des Satzes lässt sich in erster Ordnung nicht entscheiden, ob ein gekoppeltes Heisenberg-System integrabel ist. Deswegen müssen wir in unsere Überlegungen auch Funktionen höherer Ordnung einbeziehen.
Für zusammenhängende Heisenberg-Systeme ist es ausreichend, eine einzige Erhaltungsgröße erster Ordnung zu berücksichtigen. Da die Komponenten des Gesamtspins in jedem klassischen Heisenberg-System erhalten sind, bietet sich beispielsweise $S^{(3)}$ als Standard-Erhaltungsgröße an.

3.4 Erhaltungsgrößen 2. Ordnung

In diesem Abschnitt beziehen wir zusätzlich die Erhaltungsgrößen zweiter Ordnung in unsere Überlegungen ein. Die Funktionen zweiter Ordnung sind quadratisch in den Komponenten s^i_μ der Einzelspins $\vec{s}_\mu$. Zu den Funktionen zweiter Ordnung gehört beispielsweise S^2.

Definition *Eine Funktion $E : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ der Form*

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mu,\,\nu=1}^{N} \vec{s}_\mu \cdot \mathbb{E}_{\mu\,\nu}\, \vec{s}_\nu \quad \text{mit } \mathbb{E}_{\mu\,\nu} \in \mathbb{R}^{3\times 3} \text{ und } \mathbb{E}_{\mu\,\nu} = \mathbb{E}^T_{\nu\mu} \tag{43}$$

heißt Funktion zweiter Ordnung*. Sind alle $\mathbb{E}_{\mu\,\nu} = E_{\mu\,\nu}\,\mathbb{I}$ (und $E_{\mu\,\mu} = 0$), dann ist E eine* Heisenberg-Funktion*. Vertauscht E mit der Hamilton-Funktion H des Systems, gilt also $\{E, H\} = 0$, dann heißt E* Erhaltungsgröße zweiter Ordnung *bzw.* Heisenberg-Konstante *von H.*

Wie wir bereits wissen, sind die Komponenten und somit auch das Quadrat des Gesamtspins $\vec{S}$ in jedem klassischen Heisenberg-System H erhalten. Aus diesem Grund bietet sich S^2 als weitere Standard-Erhaltungsgröße an.
Jede Funktion zweiter Ordnung, die mit den Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ vertauscht, ist isotrop und hat somit die Form einer Heisenberg-Funktion. Deswegen ist die Vermutung naheliegend, dass sich jede Funktion zweiter

Ordnung, die mit den Standard-Erhaltungsgrößen $S^{(3)}$ und S^2 vertauscht, als Linearkombination von $S^{(3)}$ und einer Heisenberg-Funktion darstellen lässt. Diese Vermutung konnte jedoch nicht bewiesen werden.
Trotzdem beschränken wir uns im folgenden auf Heisenberg-Funktionen. Die Einschränkung auf Heisenberg-Funktionen ist durchaus gerechtfertigt, da wir in unseren Überlegungen auch Funktionen dritter und höherer Ordnung nicht berücksichtigen werden.
Jede Heisenberg-Funktion lässt sich als Hamilton-Funktion eines klassischen Heisenberg-Systems auffassen. Wir bestimmen nun, welche Bedingungen die Koeffizienten $E_{\mu\,\nu}$ erfüllen müssen, damit eine Heisenberg-Funktion mit der Hamilton-Funktion H oder einer anderen Heisenberg-Funktion vertauscht.

Lemma 3.3 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Weiterhin sei E eine Heisenberg-Funktion. Dann ist E eine Erhaltungsgröße von H, wenn*

$$E_{\mu\,\nu}(J_{\mu\,\lambda} - J_{\nu\,\lambda}) + E_{\mu\,\lambda}(J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}) + E_{\nu\,\lambda}(J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}) = 0 \tag{44}$$

gilt für alle $\mu < \nu < \lambda \leq N$.

Beweis
Wir betrachten die Poisson-Klammer zwischen der Hamilton-Funktion H und einer Heisenberg-Funktion E.

$$\{E, H\} = \{\sum_{\mu\,<\,\nu} E_{\mu\,\nu}\;\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \sum_{\kappa\,<\,\lambda} J_{\kappa\,\lambda}\;\vec{s}_\kappa \cdot \vec{s}_\lambda\} \tag{45}$$

$$= \sum_{\mu\,<\,\nu}\sum_{\kappa\,<\,\lambda} E_{\mu\,\nu}\,J_{\kappa\,\lambda}\,\{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\kappa \cdot \vec{s}_\lambda\} \tag{46}$$

Die Poisson-Klammer zwischen den Skalarprodukten verschwindet, wenn die Indexpaare μ, ν und λ, κ übereinstimmen oder wenn alle Indizes μ, ν, λ und κ verschieden sind.

$$= \sum_{\mu\,<\,\nu}\sum_{\lambda\,\neq\,\mu,\nu} E_{\mu\,\nu}\,(J_{\mu\,\lambda}\,\{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\lambda\} + J_{\nu\,\lambda}\,\{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\nu \cdot \vec{s}_\lambda\}) \tag{47}$$

Mit Hilfe der Beziehung $\{\vec{s}_i \cdot \vec{s}_k, \vec{s}_k \cdot \vec{s}_j\} = det(\vec{s}_i, \vec{s}_j, \vec{s}_k)$ können wir diesen Ausdruck weiter umformen. Eine Herleitung der Beziehung befindet sich im Anhang A.1.

$$= \sum_{\mu\,<\,\nu}\sum_{\lambda\,\neq\,\mu,\nu} E_{\mu\,\nu}\,(J_{\mu\,\lambda}\,det(\vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu) + J_{\nu\,\lambda}\,det(\vec{s}_\mu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\nu)) \tag{48}$$

$$= \sum_{\mu < \nu} \sum_{\lambda \neq \mu,\nu} E_{\mu\,\nu}\,(J_{\mu\,\lambda} - J_{\nu\,\lambda})\,det(\vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu) \tag{49}$$

In der Summe tritt jede Kombination der Indizes μ, ν, λ dreimal auf, aber in verschiedener Reihenfolge: erst μ, ν, λ, dann μ, λ, ν und schließlich ν, λ, μ.

$$\begin{aligned} = \ldots \;\; + \;\; & E_{\mu\,\nu}\,(J_{\mu\,\lambda} - J_{\nu\,\lambda})\,det(\vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu) + \ldots && \text{(50 a)} \\ \ldots \;\; + \;\; & E_{\mu\,\lambda}\,(J_{\mu\,\nu} - J_{\nu\,\lambda})\,det(\vec{s}_\lambda, \vec{s}_\nu, \vec{s}_\mu) + \ldots && \text{(50 b)} \\ \ldots \;\; + \;\; & E_{\nu\,\lambda}\,(J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda})\,det(\vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu, \vec{s}_\nu) + \ldots && \text{(50 c)} \end{aligned}$$

Wir fassen Determinanten mit gleichen Indizes zusammen. Dazu vertauschen wir Determinante (50 b) antizyklisch und Determinante (50 c) zyklisch.

$$(E_{\mu\,\nu}(J_{\mu\,\lambda} - J_{\nu\,\lambda}) + E_{\mu\,\lambda}(J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}) + E_{\nu\,\lambda}(J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}))\,det(\vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu) \tag{51}$$

Ist E eine Erhaltungsgröße von H, dann verschwindet die Poisson-Klammer. Aufgrund von Lemma A.1 müssen alle Koeffizienten vor den Determinanten verschwinden und wir erhalten die Gleichung

$$E_{\mu\,\nu}(J_{\mu\,\lambda} - J_{\nu\,\lambda}) + E_{\mu\,\lambda}(J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}) + E_{\nu\,\lambda}(J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}) = 0 \tag{52}$$

für alle $\mu < \nu < \lambda \leq N$. □

Zunächst wenden wir das Lemma auf ein bekanntes Beispiel an. Die Funktion $E = S^2 - N$ hat die Koeffizienten $E_{\mu\,\nu} = 2$ für alle $\mu < \nu \leq N$. Also gilt $E_{\mu\,\lambda} - E_{\nu\,\lambda} = 0$ für alle $\mu < \nu < \lambda \leq N$. Aus diesem Grund ist $S^2 - N$ und folglich auch S^2 in jedem klassischen Heisenberg-System erhalten.
Über das Lemma erhalten wir ein System von Gleichungen, mit dem wir in der Lage sind zu entscheiden, ob zwei Heisenberg-Funktionen miteinander vertauschen. Allerdings können wir diesen Gleichungen nicht unmittelbar ansehen, wie viele vertauschbare Heisenberg-Funktionen es gibt, die zudem unabhängig sind. Um diese Frage zu beantworten, wählen wir einen anderen Weg.

Lemma 3.4 *E_i sei eine Heisenberg-Funktion mit den Koeffizienten $E_{i,\,\mu\,\nu}$. Weiterhin bezeichne $\mathbb{E}_i$ die symmetrische $N \times N$-Matrix mit den Einträgen $\mathbb{E}_{i,\,\mu\,\nu} = \mathbb{E}_{i,\,\nu\mu} = E_{i,\,\mu\,\nu}$ und $\mathbb{E}_{i,\,\mu\,\mu} = 0$. Folgende Aussagen sind äquivalent:*

1. *Die Heisenberg-Funktionen $E_1(s), \ldots, E_L(s)$ sind linear unabhängig für ein $s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N) \in \mathcal{P}$.*

2. *Die Matrizen $\mathbb{E}_1, \ldots, \mathbb{E}_L$ sind linear unabhängig.*

3. *$dE_1(s), \ldots, dE_L(s)$ sind linear unabhängig für ein $s \in \mathcal{P}$.*

Beweis
Wir zeigen, dass die Negationen von Aussage 1, 2 und 3 äquivalent sind.

$2 \Rightarrow 1$. Die Matrizen $\mathbb{E}_1, \ldots, \mathbb{E}_L$ seien linear abhängig. Also gibt es ein von Null verschiedenes $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_L) \in \mathbb{R}^L$, so dass $\sum_i \lambda_i \, \mathbb{E}_i = 0$. Folglich gilt $\sum_i \lambda_i \, E_{i,\mu\nu} = 0$ für alle μ, ν und wir erhalten

$$\sum_{\mu<\nu} \left(\sum_i \lambda_i \, E_{i,\mu\nu} \right) \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu = \sum_i \lambda_i \, E_i(s) = 0 \tag{53}$$

für alle Phasenraum-Punkte s. Deswegen sind die Heisenberg-Funktionen $E_1(s), \ldots, E_L(s)$ linear abhängig für alle $s \in \mathcal{P}$.

$1 \Rightarrow 3$. Die Heisenberg-Funktionen $E_1(s), \ldots, E_L(s)$ seien linear abhängig für alle Phasenraum-Punkte s. Somit gibt es ein $\lambda \neq 0$, so dass $\sum_i \lambda_i \, E_i(s) = 0$ und folglich $d(\sum_i \lambda_i \, E_i(s)) = \sum_i \lambda_i \, dE_i(s) = 0$ für alle $s \in \mathcal{P}$. Deswegen sind $dE_1(s), \ldots, dE_L(s)$ linear abhängig für alle Punkte s im Phasenraum $\mathcal{P}$.

$3 \Rightarrow 2$. Nun seien $dE_1(s), \ldots, dE_L(s)$ linear abhängig für alle $s \in \mathcal{P}$. Wir können die Reihenfolge der Argumente umkehren. Allerdings erhalten wir aus $d(\sum_i \lambda_i \, E_i(s)) = 0$ die schwächere Bedingung

$$\sum_i \lambda_i \, E_i(s) = \sum_{\mu<\nu} \left(\sum_i \lambda_i \, E_{i,\mu\nu} \right) \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu = c \in \mathbb{R} \tag{54}$$

für alle $s \in \mathcal{P}$. Nach Lemma A.1 gilt $\sum_i \lambda_i \, E_{i,\mu\nu} = 0$ für alle $\mu < \nu$. Aufgrund der Symmetrie $\mathbb{E}_{i,\mu\nu} = \mathbb{E}_{i,\nu\mu}$ und $\mathbb{E}_{i,\mu\mu} = 0$ folgt $\sum_i \lambda_i \, \mathbb{E}_i = 0$. Deswegen sind die Matrizen $\mathbb{E}_1, \ldots, \mathbb{E}_L$ linear abhängig. □

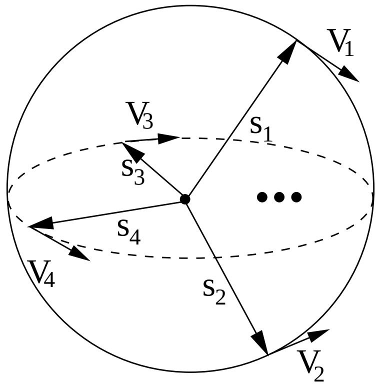
Satz 3.5 *Es gibt höchstens $N-1$ vertauschbare Heisenberg-Funktionen, die linear unabhängig sind.*

Beweis
Wir nehmen im folgenden Bezug auf das Buch von V.I. Arnold [3, S. 271 ff]. Zu jeder Funktion $E : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ gibt es ein Vektorfeld V^E auf dem Phasenraum

$\mathcal{P}$. Für ein System von N klassischen Spins ist dieses Vektorfeld ein N-Tupel mit den Elementen

$$\vec{V}_\mu^E = \{\vec{s}_\mu, E\} = \frac{\partial E}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu. \tag{55}$$

Wir können das Vektorfeld V^E durch tangentiale Vektoren $\vec{V}_\mu^E$ an den Stellen $\vec{s}_\mu \in \mathcal{S}^2$ (Oberfläche der Einheitskugel) darstellen.



Wenn eine Menge von Funktionen $E_1, \ldots, E_L$ funktional unabhängig ist, dann sind nach [3, S. 273] die zugehörigen Vektorfelder $V^{E_1}, \ldots, V^{E_L}$ linear unabhängig für ein $s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N) \in \mathcal{P}$. Außerdem sind die Vektorfelder $V^{E_1}, \ldots, V^{E_L}$ tangential zu der Hyperfläche

$$M_c = \{\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N : E_i = c_i \in \mathbb{R}, i = 1, \ldots, L\}, \tag{56}$$

falls die Funktionen $E_1, \ldots, E_L$ untereinander vertauschen. Die Hyperfläche M_c hat die Dimension $dim(\mathcal{P}) - L = 2\,N - L$. Tangential zu dieser Fläche gibt es höchstens $2\,N - L$ linear unabhängige Vektorfelder. Folglich gibt es höchstens $L = N$ unabhängige, vertauschbare Funktionen $E_1, \ldots, E_L$.

Wir wollen nun zeigen, dass sich die Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ nicht durch Heisenberg-Funktionen darstellen lassen. Dazu betrachten wir

$$\sum_{\mu=1}^{N} \vec{V}_\mu^E = \sum_{\mu=1}^{N} \{\vec{s}_\mu, E\} = \{\sum_{\mu=1}^{N} \vec{s}_\mu, E\} = \{\vec{S}, E\} \tag{57}$$

$$= \begin{pmatrix} \{S^{(1)}, E\} \\ \{S^{(2)}, E\} \\ \{S^{(3)}, E\} \end{pmatrix}. \tag{58}$$

Da die Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ mit jedem Skalarprodukt $\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu$ vertauschen, gilt $\{\vec{S}, E\} = 0$, wenn E eine Heisenberg-Funktion ist. Ist E jedoch eine Komponente des Gesamtspins, beispielsweise $E = S^{(3)}$, so gilt $\{\vec{S}, E\} = (-S^{(2)}, S^{(1)}, 0) \neq 0$ für $\vec{S} \neq (0, 0, S^{(3)})$. An dieser Stelle ist das Vektorfeld von $S^{(3)}$ linear unabhängig von den Vektorfeldern einer beliebigen Anzahl von Heisenberg-Funktionen. Folglich lassen sich die Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ nicht durch Heisenberg-Funktionen darstellen.

Wenn es $L = N$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Funktionen gäbe, dann würden wir zusammen mit einer Komponente des Gesamtspins, wie zum Beispiel $S^{(3)}$, insgesamt $N + 1$ unabhängige, vertauschbare Funktionen erhalten. Deswegen gilt $L < N$. □

Nach Aussage des Satzes gibt es in einem klassischen Heisenberg-System höchstens $N - 1$ vertauschbare, unabhängige Heisenberg-Konstanten. Wenn es $N - 1$ dieser Erhaltungsgrößen gibt, dann erhalten wir zusammen mit $S^{(3)}$ insgesamt N unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen. Nach dem Liouvilleschen Satz ist das System integrabel.

Definition *Ein klassisches Heisenberg-System H ist* Heisenberg-integrabel*, wenn es $N - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten gibt.*

Natürlich können wir nicht voraussetzen, dass jedes integrable System auch Heisenberg-integrabel ist. Für erste Untersuchungen ist es dennoch sinnvoll, sich auf die Klasse der Heisenberg-integrablen Systeme zu beschränken.

3.5 Gleichförmige Kopplung

An dieser Stelle betrachten wir einfache Beispiele für Heisenberg-integrable Systeme. Ein System, das aus einem einzigen Spin besteht, ist offensichtlich Heisenberg-integrabel. Der sogenannte *Spin-Dimer* ist ein System von zwei miteinander gekoppelten Spins. Weil in diesem System $H = J\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ und $S^{(3)}$ erhalten sind, ist der Spin-Dimer ebenfalls Heisenberg-integrabel. In einem gleichseitigen Spin-Dreieck sind $H = J\,(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3)$, $S^{(3)}$ und $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3$ erhalten. Also ist auch dieses System Heisenberg-integrabel. Die drei genannten Beispiele gehören zu der Klasse der Pantaeder.

Definition *Ein klassisches Heisenberg-System H der Form*

$$H = J \sum_{\mu < \nu}^{N} \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu = \frac{J}{2}\,(S^2 - N) \tag{59}$$

heißt N-Pantaeder.

Die gleichförmige 3er-Kette ist Heisenberg-integrabel und gehört nicht zu den Pantaedern. In diesem System sind $H = J\,(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3)$, $S^{(3)}$ und zum Beispiel $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3$ erhalten. Die gleichförmige Kette und die Pantaeder gehören zu einer gemeinsamen – Heisenberg-integrablen – Klasse von Systemen.

Satz 3.6 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Wenn es eine Zerlegung von H in zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B gibt, die nicht koppeln oder gleichförmig koppeln, dann ist H ebenfalls Heisenberg-integrabel.*

Beweis
H sei ein klassisches Heisenberg-System und habe eine Zerlegung in zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B.

$$H = H_A + H_B + H_{AB} \tag{60}$$

H_A und H_B haben aufgrund der Definition $N_A - 1$ bzw. $N_B - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten. Da die beiden Teilsysteme getrennt sind, vertauscht jede Erhaltungsgröße von H_A mit jeder Erhaltungsgröße von H_B. Allerdings vertauschen diese insgesamt $N_A - 1 + N_B - 1 = N - 2$ Heisenberg-Funktionen im allgemeinen nicht mit der Kopplung H_{AB} zwischen den Teilsystemen und deswegen nicht mit H. Wenn H_A und H_B jedoch nicht koppeln oder gleichförmig koppeln, dann ist

$$H_{AB} = \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2) \quad \text{mit} \quad c_{AB} \in \mathbb{R}. \tag{61}$$

$\vec{S}$, $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ bezeichnen dabei den Gesamtspin von H, H_A und H_B. Für die Erhaltungsgrößen von H_A gilt

$$\begin{aligned}
\{E_A, H\} &= \{E_A, H_{AB}\} && \text{(62 a)}\\
&= \{E_A, \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2)\} && \text{(62 b)}\\
&= \frac{c_{AB}}{2}\,(\underbrace{\{E_A, S^2\}}_{=0} - \underbrace{\{E_A, S_A^2\}}_{=0} - \underbrace{\{E_A, S_B^2\}}_{=0}) = 0 && \text{(62 c)}
\end{aligned}$$

und für die Erhaltungsgrößen von H_B gilt entsprechend $\{E_B, H_{AB}\} = 0$. Aus diesem Grund erhalten wir zusammen mit $S^2 - S_A^2 - S_B^2$ insgesamt $N - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten und folglich ist H

Heisenberg-integrabel. □

Nach Aussage des Satzes ist ein klassisches Heisenberg-System, das sich durch die gleichförmige Kopplung von zwei Heisenberg-integrablen Teilsystemen konstruieren lässt, ebenfalls Heisenberg-integrabel. Zu dieser Klasse gehören jedoch nicht alle Heisenberg-integrablen Systeme.
Das allgemeine Spin-Dreieck ist ein Heisenberg-integrables System, in dem $H = J_{12}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + J_{13}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3 + J_{23}\,\vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3$, S^2 und $S^{(3)}$ erhalten sind. Jedoch lässt sich das allgemeine Spin-Dreieck nicht durch die gleichförmige Kopplung von Teilsystemen konstruieren.

3.6 Integrabilität von Teilsystemen

Bisher haben wir gezeigt, dass ein klassisches Heisenberg-System, das durch die gleichförmige Kopplung von zwei Heisenberg-integrablen Teilsystemen entsteht, ebenfalls Heisenberg-integrabel ist. Nun können wir beweisen, dass in einem Heisenberg-integrablen System alle Teilsysteme – unabhängig von der Kopplung – Heisenberg-integrabel sind.

Lemma 3.7 *H sei ein klassisches Heisenberg-System und habe außerdem eine Heisenberg-Konstante E. Dann ist die Einschränkung E_A von E eine Heisenberg-Konstante des entsprechenden Teilsystems H_A von H.*

Beweis
Nach Lemma 3.3 ist eine Heisenberg-Funktion E eine Erhaltungsgröße von H, wenn die Gleichung

$$E_{\mu\nu}(J_{\mu\lambda} - J_{\nu\lambda}) + E_{\mu\lambda}(J_{\nu\lambda} - J_{\mu\nu}) + E_{\nu\lambda}(J_{\mu\nu} - J_{\mu\lambda}) = 0 \tag{63}$$

gilt für alle $\mu < \nu < \lambda \leq N$. Diese Gleichung gilt deswegen auch für alle $\mu < \nu < \lambda$ mit $\mu, \nu, \lambda \in A \subseteq \{1, \ldots, N\}$. Damit ist die Einschränkung E_A ($E_A \neq 0$) eine Heisenberg-Konstante des Teilsystems H_A. □

Satz 3.8 *H sei ein klassisches Heisenberg-System und Heisenberg-integrabel. Dann ist auch jedes Teilsystem H_A Heisenberg-integrabel.*

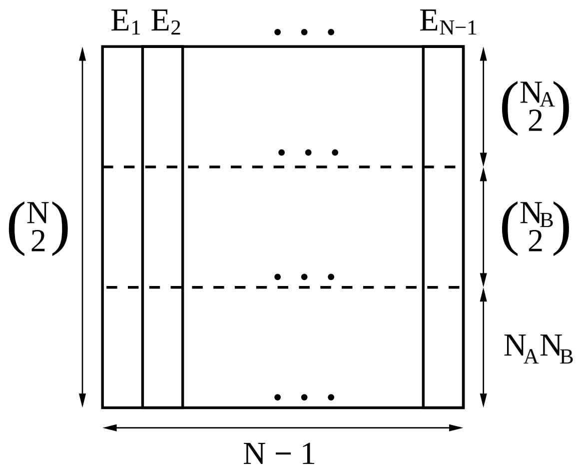
Beweis
H sei ein klassisches Heisenberg-System und Heisenberg-integrabel. Also gibt es nach Definition $N-1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten

$E_1, \ldots, E_{N-1}$ der Form

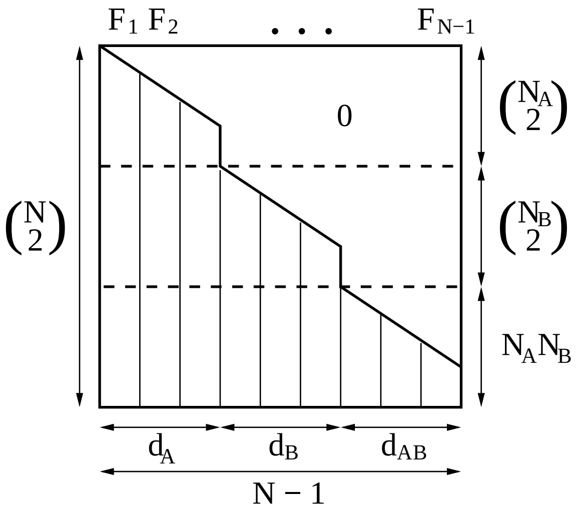
$$E_i = \sum_{\mu < \nu} E_{i,\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu. \tag{64}$$

Wir betrachten eine beliebige Zerlegung von H in zwei Teilsysteme H_A und H_B. Diese Systeme sind Einschränkungen von H auf zwei disjunkte Mengen $A, B \subset \{1, \ldots, N\}$ mit $A \neq \emptyset$ und $B \neq \emptyset$. N_A sei die Anzahl der Elemente in A und entsprechend N_B die Anzahl der Elemente in B. Es gilt $N = N_A + N_B$.

Wir ordnen nun die Koeffizienten $E_{i,\mu\nu}$ in einer Matrix mit $\binom{N}{2}$ Zeilen und $N-1$ Spalten an. Die Koeffizienten von E_i stehen in der i-ten Spalte und seien in der Reihenfolge $\mu < \nu$ mit $\mu, \nu \in A$, dann $\mu < \nu$ mit $\mu, \nu \in B$ und schließlich $\mu < \nu$ mit $\mu \in A$, $\nu \in B$ angeordnet. Auf diese Weise unterteilen wir die Matrix in drei Blöcke mit $\binom{N_A}{2}$, $\binom{N_B}{2}$ und $N_A\, N_B$ Zeilen.



Wir transformieren diese Matrix mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren in die untere Dreiecksform. Dabei sind beliebige Vertauschungen von Spalten zugelassen und alle Vertauschungen von Zeilen innerhalb der drei Blöcke.



Die im Verfahren angewendeten, elementaren Umformungen (Multiplikation einer Spalte mit einem Faktor $\alpha \neq 0$, Addition einer Spalte zu einer anderen, Vertauschen zweier Spalten oder zweier Zeilen) verändern den aufgespannten Raum nicht. Deswegen stehen in den Spalten $N-1$ unabhängige $F_1, \ldots, F_{N-1}$ und es gilt $d_A+d_B+d_{AB} = N-1$. Außerdem sind $F_1, \ldots, F_{N-1}$ vertauschbare Heisenberg-Konstanten.

$$\{F_i, H\} = \{\sum_k \alpha_k \, E_k, H\} = \sum_k \alpha_k \, \{E_k, H\} = 0 \tag{65 a}$$

$$\{F_i, F_j\} = \{\sum_k \alpha_k \, E_k, \sum_l \beta_l \, E_l\} = \sum_{k,l} \alpha_k \, \beta_l \, \{E_k, E_l\} = 0 \tag{65 b}$$

Nach Aussage von Lemma 3.7 sind Einschränkungen von $F_1, \ldots, F_{d_A}$ auf A Heisenberg-Konstanten vom Teilsystem H_A. Aufgrund von Satz 3.5 gibt es höchstens $N_A - 1$ dieser Erhaltungsgrößen. Dieselbe Überlegung gilt für $F_{d_A+1}, \ldots, F_{d_A+d_B}$ und das Teilsystem H_B. Damit erhalten wir

$$d_A \leq N_A - 1 \tag{66 a}$$

$$d_B \leq N_B - 1 \tag{66 b}$$

und aus $N - 1 = d_A + d_B + d_{AB} \leq N_A - 1 + N_B - 1 + d_{AB} = N - 2 + d_{AB}$

$$d_{AB} \geq 1. \tag{66 c}$$

Wir wollen nun zeigen, dass außerdem $d_{AB} \leq 1$ gilt. In diesem Fall führt $d_A < N_A - 1$ zu $N - 1 = d_A + d_B + d_{AB} < N_A - 1 + N_B - 1 + 1 = N - 1$ und damit zu einem Widerspruch. Das Teilsystem H_A ist folglich Heisenberg-integrabel.

Dazu betrachten wir ein $F \in \{F_{d_A+d_B+1}, \ldots, F_{N-1}\}$. Die Einschränkungen von F auf A und B sind $F_A = F_B = 0$. Aufgrund von Lemma 3.3 gilt für $\mu, \nu \in A$ oder $\mu, \nu \in B$ die Gleichung

$$F_{\mu\,\lambda}(J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}) + F_{\nu\,\lambda}(J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}) = 0. \tag{67}$$

Sei nun $\mu, \nu \in A$ und $\lambda \in B$. Dann ist das Verhältnis der Koeffizienten

$$\frac{F_{\mu\,\lambda}}{F_{\nu\,\lambda}} = \frac{J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}}{J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}} \tag{68}$$

eindeutig bestimmt, falls der Zähler $J_{\mu\,\nu} - J_{\mu\,\lambda}$ und der Nenner $J_{\nu\,\lambda} - J_{\mu\,\nu}$ nicht gleichzeitig verschwinden. Betrachten wir also den Fall

$$J_{\mu\,\nu} = J_{\mu\,\lambda} = J_{\nu\,\lambda}. \tag{69}$$

Für festes $\mu \in A$ und $\lambda \in B$ sei $M(\mu, \lambda)$ die Menge derjenigen $\nu \in A$, die den Fall (69) erfüllen. Wenn $M(\mu, \lambda) = A$ gilt, dann ist H_A ein N_A-Pantaeder und somit Heisenberg-integrabel. Wenn dagegen $M(\mu, \lambda) \neq A$ ist, dann gibt es ein $\kappa \in A$ mit $\kappa \notin M(\mu, \lambda)$ und das Verhältnis $F_{\mu\,\lambda} \,/\, F_{\kappa\,\lambda}$ ist eindeutig bestimmt. Ebenso ist $F_{\nu\,\lambda} \,/\, F_{\kappa\,\lambda}$ eindeutig für $\nu \in M(\mu, \lambda)$ und somit auch

$$\frac{F_{\mu\,\lambda}}{F_{\nu\,\lambda}} = \frac{F_{\mu\lambda}}{F_{\kappa\lambda}} \cdot \frac{F_{\kappa\lambda}}{F_{\nu\lambda}}. \tag{70}$$

Die analoge Argumentation liefert die Eindeutigkeit von $F_{\nu\,\lambda} \,/\, F_{\nu\,\kappa}$ für $\nu \in A$ und $\lambda, \kappa \in B$. Insgesamt ist das Verhältnis $F_{\mu\,\lambda} \,/\, F_{\nu\,\kappa}$ eindeutig für alle $\mu, \nu \in A$ und $\lambda, \kappa \in B$. Der Lösungsraum für die Koeffizienten von F ist also eindimensional. Aus diesem Grund ist $d_{AB} \leq 1$. □

Durch den Beweis des Satzes haben wir außerdem gezeigt:

Lemma 3.9 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Weiterhin seien H_A und H_B eine beliebige Zerlegung von H. Wenn H Heisenberg-integrabel ist, dann lassen sich $N - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten mit den folgenden Eigenschaften finden:*

1. *$N_A - 1$ Heisenberg-Konstanten verschwinden auf B. Dagegen sind die Einschränkungen auf A Erhaltungsgrößen von H_A, die unabhängig und vertauschbar sind.*

2. *$N_B - 1$ Heisenberg-Konstanten verschwinden auf A. Dagegen sind die Einschränkungen auf B Erhaltungsgrößen von H_B, die unabhängig und vertauschbar sind.*

3. *Eine Heisenberg-Konstante verschwindet auf A und B.*

Beweis
Es bleibt zu zeigen, dass die $N_A - 1$ Heisenberg-Konstanten von Punkt 1 auf B verschwinden. Dies können wir mit Hilfe von weiteren Gauß-Transformationen erreichen (siehe Blockmatrix).

Nach Aussage des Satzes ist in einem Heisenberg-integrablen System auch jedes Teilsystem Heisenberg-integrabel. Der Umkehrschluss ist jedoch nicht möglich. Auch wenn alle (echten) Teilsysteme Heisenberg-integrabel sind, kann das Gesamtsystem nicht Heisenberg-integrabel sein.
Die (gleichförmige) 4er-Kette beispielsweise ist nicht Heisenberg-integrabel. Allerdings sind alle klassischen Heisenberg-Systeme mit weniger als 4 Spins Heisenberg-integrabel.

3.7 Heisenberg-Graphen

3.7.1 Gleichförmige Zerlegung

Die Heisenberg-Graphen sind klassische Heisenberg-Systeme, die über eine Kopplungsmatrix $\mathbb{J}$ mit den Einträgen $J_{\mu\nu} \in \{0, 1\}$ beschrieben werden. Für Graphen lassen sich weitere Aussagen über Erhaltungsgrößen, Kopplung und Teilsysteme machen, die im allgemeinen Fall $J_{\mu\nu} \in \mathbb{R}$ nicht gültig sind.
Wie wir gezeigt haben, ist ein klassisches Heisenberg-System, das durch die gleichförmige Kopplung von Heisenberg-integrablen Teilsystemen entsteht, ebenfalls Heisenberg-integrabel. Im allgemeinen Fall lassen sich auf diese Art und Weise nicht alle Heisenberg-integrablen Systeme – wie beispielsweise das allgemeine Spindreieck – erzeugen. Allerdings ist diese Konstruktion für jeden Heisenberg-integrablen Graphen möglich.

Satz 3.10 *H sei ein Heisenberg-Graph und Heisenberg-integrabel. Wenn H zusammenhängend ist, dann gibt es eine Zerlegung von H in zwei Teilsysteme H_A und H_B, die gleichförmig koppeln und Heisenberg-integrabel sind. Wenn H nicht zusammenhängend ist, dann gibt es eine Zerlegung von H in zwei ungekoppelte, Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B.*

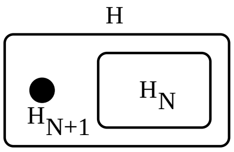
Beweis
Der Beweis des Satzes 3.10 erfolgt durch vollständige Induktion über die Zahl N der Knoten.

Verankerung: Alle Graphen bis $N = 3$ Knoten sind Heisenberg-integrabel. Für diese Systeme ist die Aussage von Satz 3.10 gültig (siehe Tabelle 1).

Voraussetzung: Der Satz 3.10 ist gültig für Graphen mit N Knoten.

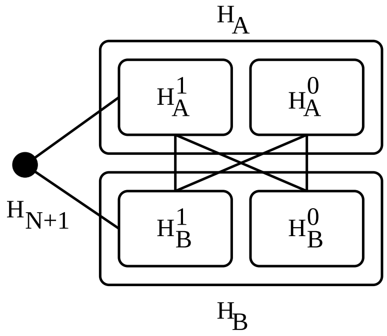
Schritt: Wir betrachten einen Graphen H mit $N + 1$ Knoten. Weiterhin sei H Heisenberg-integrabel. Wenn der Graph nicht zusammenhängend ist, dann besteht dieser nach Definition aus ungekoppelten Teilgraphen. Diese Teilsysteme sind nach Satz 3.8 Heisenberg-integrabel und Satz 3.10 ist gültig. Aus diesem Grund sei H im folgenden zusammenhängend.

Nun zerlegen wir H in zwei Teilsysteme H_{N+1} und H_N. Dabei sei H_{N+1} die Einschränkung von H auf den Knoten $\{N + 1\}$ und H_N die Einschränkung von H auf die Knoten $\{1, \dots, N\}$. Aufgrund von Lemma A.2 können wir den Knoten $N + 1$ so wählen, dass H_N zusammenhängend ist. Nach Satz 3.8 ist H_N Heisenberg-integrabel.

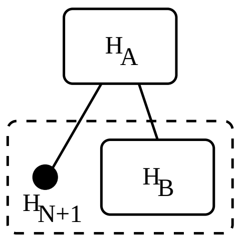


Nun zerlegen wir den Graphen H_N weiter. Nach Voraussetzung gibt es zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B mit gleichförmiger Kopplung zwischen den Systemen. H_A und H_B sind Einschränkungen von H_N auf zwei disjunkte Mengen $A, B \subset \{1, \dots, N\}$ mit $A \neq \emptyset$ und $B \neq \emptyset$.
H_A wiederum zerlegen wir in ein Teilsystem H_A^0 ohne Kopplung zu H_{N+1} und in ein Teilsystem H_A^1 mit gleichförmiger Kopplung zu H_{N+1}. H_A^0 und H_A^1 sind Einschränkungen von H_A auf zwei disjunkte Mengen $A_0, A_1 \subseteq A$. Auf die gleiche Weise führen wir die Zerlegung von H_B durch.

Aus $A \neq \emptyset$ folgt $A_0 \neq \emptyset$ oder $A_1 \neq \emptyset$, aus $B \neq \emptyset$ folgt $B_0 \neq \emptyset$ oder $B_1 \neq \emptyset$. Gilt $A_0 = B_0 = \emptyset$, dann koppelt H_N gleichförmig mit H_{N+1} und die Aussage von Satz 3.10 stimmt. Würde dagegen $A_1 = B_1 = \emptyset$ gelten, dann wären H_N und H_{N+1} ungekoppelt. Aber H ist zusammenhängend.



Wir betrachten nun $A_1 \neq \emptyset$ und $B_0 \neq \emptyset$ (Der andere mögliche Fall $A_0 \neq \emptyset$ und $B_1 \neq \emptyset$ geht analog). Gilt zusätzlich $A_0 = \emptyset$, dann koppelt sowohl H_{N+1} als auch H_B gleichförmig mit H_A. Das System H_A ist Heisenberg-integrabel und nach Satz 3.8 auch die Einschränkung von H auf $\{N+1\} \cup B$. Folglich ist Satz 3.10 für diesen Fall gültig.



Sei nun $A_0 \neq \emptyset$. Wir können voraussetzen, dass H_A^0 und H_A^1 nicht gleichförmig miteinander koppeln. Falls diese Voraussetzung nicht erfüllt ist, können wir die Zerlegung umsortieren, indem wir $A_0' = \emptyset$ und $B_0' = A_0 \cup B_0$ bilden, A_1 und B_1 aber unverändert lassen. Für diesen Fall haben wir jedoch die Gültigkeit von Satz 3.10 bereits gezeigt.

Da H_N Heisenberg-integrabel ist, hat dieses Teilsystem nach Definition $N-1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten. Diese Erhaltungsgrößen können wir gemäß Lemma 3.9 so wählen und so auf das Gesamtsystem H erweitern, dass es eine weitere Heisenberg-Konstante der Form

$$E = \sum_{\mu < N+1} E_{\mu\, N+1}\ \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_{N+1} \tag{71}$$

gibt, die unabhängig und vertauschbar ist. Zudem sind die Koeffizienten $E_{\mu\, N+1}$ nicht eindeutig festgelegt, sondern nur das Verhältnis $E_{\mu\, N+1}/E_{\lambda\, N+1}$.

Aufgrund von Lemma 3.3 gilt die Gleichung

$$E_{\mu\,N+1}(J_{\mu\,\lambda} - J_{\lambda\,N+1}) + E_{\lambda\,N+1}(J_{\mu\,N+1} - J_{\mu\,\lambda}) = 0 \tag{72}$$

für alle $\mu < \lambda < N+1$, da $E_{\mu\,\lambda} = 0$.

Wir wollen nun zeigen, dass der Fall $A_0, A_1, B_0 \neq \emptyset$ zum Widerspruch führt. Dazu betrachten wir Gleichung (72) für die folgenden Fälle:

- $\mu_0 \in B_0$ und $\lambda_1 \in A_1$ ($J_{\mu_0\,\lambda_1} = J_{\lambda_1\,N+1} = 1$ und $J_{\mu_0\,N+1} = 0$)

$$\Rightarrow E_{\lambda_1\,N+1} = 0 \tag{73 a}$$

- $\mu_1 \in B_1$ und $\lambda_0 \in A_0$ ($J_{\mu_1\,\lambda_0} = J_{\mu_1\,N+1} = 1$ und $J_{\lambda_0\,N+1} = 0$)

$$\Rightarrow E_{\mu_1\,N+1} = 0 \tag{73 b}$$

- $\mu_0 \in B_0$ und $\lambda_0 \in A_0$ ($J_{\mu_0\,N+1} = J_{\lambda_0\,N+1} = 0$ und $J_{\mu_0\,\lambda_0} = 1$)

$$\Rightarrow E_{\mu_0\,N+1} = E_{\lambda_0\,N+1} \tag{73 c}$$

- $\lambda_0 \in A_0$ und $\lambda_1 \in A_1$ mit $J_{\lambda_0\,\lambda_1} = 0$ ($J_{\lambda_0\,N+1} = 0$ und $J_{\lambda_1\,N+1} = 1$)

$$\Rightarrow E_{\lambda_0\,N+1} = 0 \tag{73 d}$$

Da H_A^0 und H_A^1 nicht gleichförmig koppeln, gibt es ein $\lambda_0 \in A_0$ und ein $\lambda_1 \in A_1$ mit $J_{\lambda_0\,\lambda_1} = 0$. Für dieses λ_0 ist aufgrund von Gleichung (73 d) der Koeffizient $E_{\lambda_0\,N+1}$ eindeutig festgelegt. Unter Verwendung von Gleichung (73 c) folgt, dass $E_{\mu_0\,N+1}$ eindeutig ist für alle $\mu_0 \in B_0$. Aus diesem Grund ist umgekehrt $E_{\lambda_0\,N+1}$ eindeutig für alle $\lambda_0 \in A_0$. Über Gleichung (73 a) und (73 b) werden alle übrigen Koeffizienten eindeutig festgelegt. Darüber hinaus sind alle Koeffizienten Null. Dies führt zum Widerspruch. $\square$

Nach Aussage des Satzes lässt sich jeder Heisenberg-integrable Graph in gleichförmig gekoppelte Teilgraphen zerlegen. Aus diesem Grund können wir die Menge der Heisenberg-integrablen Graphen iterativ erzeugen.
Das kleinste Heisenberg-integrable System besteht aus einem einzelnen Spin. Der Spin-Dimer entsteht durch die Kopplung von zwei einzelnen Spins. Das Spin-Dreieck lässt sich durch die gleichförmige Kopplung von einem Dimer mit einem einzelnen Spin und die 3er-Kette lässt sich durch die gleichförmige Kopplung von zwei ungekoppelten Spins mit einem weiteren Spin erzeugen. In der Tabelle 1 sind alle Heisenberg-integrablen Graphen bis $N = 5$ Spins

aufgeführt.
Um entscheiden zu können, ob ein Graph Heisenberg-integrabel ist, müssen wir nach wie vor $N-1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten finden. Hierbei können wir uns auf Heisenberg-Konstanten beschränken, die Eigenschaften gemäß dem folgenden Satz haben.

Satz 3.11 *H sei ein Heisenberg-Graph und Heisenberg-integrabel. Dann gibt es $N-1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten $E_1, \ldots, E_{N-1}$ mit den folgenden Eigenschaften:*

1. *Die Kantenmengen der E_i sind disjunkt:*
   $M_E(E_i) \cap M_E(E_j) = \emptyset$ *für* $i \neq j$ [3]

2. *Die Koeffizienten der E_i sind entweder* 0 *oder* 1*:*
   $E_{i,\mu\nu} \in \{0, 1\}$

3. *S^2 ist eine Linearkombination der E_i:*
   $\sum_{i=1}^{N-1} E_i = \frac{1}{2}(S^2 - N)$

4. *H ist eine Linearkombination der E_i:*
   $H = \sum_{i \in M} E_i$ *mit* $M \subseteq \{1, \ldots, N-1\}$

5. *Für $N \geq 2$ gibt es genau ein $E_i(\equiv F)$ mit vollständiger Knotenmenge:*
   $M_V(F) = \{1, \ldots, N\}$ *und* $M_V(E_i) \subset M_V(F)$ *für* $E_i \neq F$ [4]

6. *Sei $N \geq 3$ und $E_i(\equiv G)$ eine Heisenberg-Konstante mit größter, aber unvollständiger Knotenmenge: $G \neq F$ und $|M_V(G)| \geq |M_V(E_i)|$ für $E_i \neq F$. Weiterhin sei $M_A = M_V(G)$ und $M_B = \{1, \ldots, N\} \setminus M_A$. Dann gilt für $E_i \neq F$*

   (a) $M_E(E_i) \subseteq M_A$ *oder*

   (b) $M_E(E_i) \subseteq M_B$

   und $F = \frac{1}{2}(S^2 - S_A^2 - S_B^2)$.

Beweis
Der Beweis von Satz 3.11 erfolgt durch vollständige Induktion über die Zahl N der Knoten.

[3] Der Index E steht für Kante (engl. edge).
[4] Der Index V steht für Knoten (engl. vertex).

Verankerung: Wir betrachten die Ergebnisse in Tabelle 1. Ein einzelner Knoten ($N = 1$) erfüllt die Eigenschaften 1 bis 4. Punkt 5 ist dagegen erst für Graphen mit $N = 2$ Knoten zutreffend.

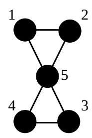
Voraussetzung: Die Punkte 1 bis 5 von Satz 3.11 gelten für Graphen mit $N \geq 2$ Knoten.

Schritt: Wir betrachten einen Graphen H mit $N + 1$ Knoten. Weiterhin sei H Heisenberg-integrabel. Aufgrund von Satz 3.10 gibt es eine Zerlegung in zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B mit gleichförmiger oder keiner Kopplung zwischen den Systemen.

$$H = H_A + H_B + \frac{c_{AB}}{2} \left(S^2 - S_A^2 - S_B^2\right) \quad \text{mit} \quad c_{AB} \in \{0, 1\} \tag{74}$$

H_A hat $N_A - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten. Diese sind ebenfalls Erhaltungsgrößen von H. Entsprechendes gilt für H_B. Nur ein Teilsystem kann aus einem einzelnen Knoten bestehen. In diesem Fall gelten die Punkte 1 bis 4. Sonst gilt nach Voraussetzung zusätzlich Punkt 5.
Zusammen mit $F = \frac{1}{2}(S^2 - S_A^2 - S_B^2)$ erhalten wir insgesamt $(N + 1) - 1$ unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen, die die Eigenschaften 1 bis 5 erfüllen. Nun müssen wir nur noch G geeignet wählen. Falls H_A mindestens so viele Knoten besitzt wie H_B, dann nehmen wir $G = F_A$. Sonst nehmen wir $G = F_B$. Mit dieser Wahl ist Punkt 6 von Satz 3.11 zutreffend. □

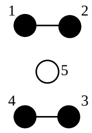
Der Satz vereinfacht nicht nur die Suche nach unabhängigen, vertauschbaren Heisenberg-Konstanten, sondern ist außerdem Grundlage für ein Verfahren, mit dem sich ein Heisenberg-integrabler Graph in gleichförmig gekoppelte Teilgraphen zerlegen lässt. Dieses Zerlegungsverfahren erklären wir anhand eines einfachen Beispiels.
Die sogenannte *Fliege* ist ein Heisenberg-integrables 5-Spin-System, das aus zwei gleichseitigen Dreiecken besteht, die einen Spin gemeinsam haben.



$$H = (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_5 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_5) + (\vec{s}_3 \cdot \vec{s}_4 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_5 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_5) \tag{75}$$

Die Fliege besitzt die unabhängigen, vertauschbaren Heisenberg-Konstanten $E_1 = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$, $E_2 = \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_4$, $E_3 = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_4 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_4$ und $E_4 = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_5 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_5 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_5 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_5$. Diese Heisenberg-Konstanten haben alle Eigenschaften des Satzes.
Die Heisenberg-Konstante $F = E_4$ enthält jeden Index. $G = E_3$ enthält nicht

alle Indizes, aber mehr als E_1 und E_2. Deswegen bilden die Indizes von E_3 die Menge $A = \{1, 2, 3, 4\}$. Die übrigen Indizes bilden die Menge $B = \{5\}$.
Zu Beginn des Verfahrens setzen wir $H_A = H_B = 0$ und $H_{AB} = H$. Also gilt $H = H_A + H_B + H_{AB}$. Die Indizes von E_1 gehören zu A. Da E_1 in H vorkommt, setzen wir $H_A \to H_A + E_1$ und $H_{AB} \to H_{AB} - E_1$. Die Indizes von E_2 und E_3 gehören auch zu A. Weil nur E_2 in H vorkommt, setzen wir $H_A \to H_A + E_2$ und $H_{AB} \to H_{AB} - E_2$. Da die Indizes von E_4 sowohl zu A als auch zu B gehören, ist nichts weiter zu tun. Wir erhalten insgesamt $H_A = E_1 + E_2$, $H_B = 0$ und $H_{AB} = E_4$.



Mit Hilfe des Verfahrens haben wir die Fliege in zwei Teilgraphen H_A und H_B mit gleichförmiger Kopplung H_{AB} zwischen den Teilgraphen zerlegt. H_A besteht aus zwei ungekoppelten Spin-Dimeren und H_B aus einem einzelnen Spin. Für die Fliege ist die Zerlegung eindeutig.
Allerdings kann es für einen Heisenberg-integrablen Graphen auch mehrere Zerlegungen geben. Zum Beispiel können wir einen N-Pantaeder in einen $(N-1)$-Pantaeder und einen einzelnen Spin oder in einen $(N-2)$-Pantaeder und einen Spin-Dimer zerlegen. In diesem Fall ist das Ergebnis des Verfahrens von der Wahl der Erhaltungsgrößen abhängig.

3.7.2 4er-Kette

Wie wir gezeigt haben, ist in einem Heisenberg-integrablen System auch jedes Teilsystem Heisenberg-integrabel. Dagegen ist die (gleichförmige) 4er-Kette ein Beispiel für ein System, das nicht Heisenberg-integrabel ist, obwohl jedes (echte) Teilsystem Heisenberg-integrabel ist. Deswegen ist der Umkehrschluss im allgemeinen nicht möglich. Allerdings ist die 4er-Kette der einzige Graph, der nicht Heisenberg-integrabel ist und nur Heisenberg-integrable (echte) Teilgraphen besitzt.

Satz 3.12 *H sei ein Heisenberg-Graph und nicht Heisenberg-integrabel. Dann ist die 4er-Kette ein Teilsystem von H.*

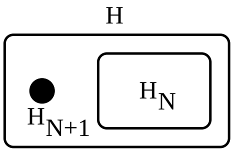
Beweis
Der Beweis des Satzes 3.12 erfolgt durch vollständige Induktion über die Zahl N der Knoten.

Verankerung: Bis $N = 4$ Knoten ist die 4er-Kette der einzige Graph, der nicht Heisenberg-integrabel ist (siehe Tabelle 1).

Voraussetzung: Der Satz 3.12 ist gültig für Graphen mit N Knoten.

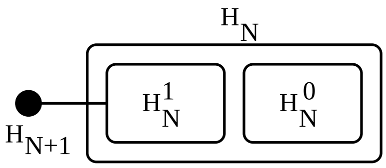
Schritt: Wir betrachten einen Graphen H mit $N+1$ Knoten. Weiterhin sei H nicht Heisenberg-integrabel. Wenn der Graph nicht zusammenhängend ist, dann besteht dieser nach Definition aus ungekoppelten Teilgraphen. Da H nicht Heisenberg-integrabel ist, folgt nach Aussage von Satz 3.6, dass mindestens einer dieser Teilgraphen nicht Heisenberg-integrabel ist und nach Voraussetzung die 4er-Kette enthält. Aus diesem Grund sei H im folgenden zusammenhängend.

Nun zerlegen wir H in zwei Teilsysteme H_{N+1} und H_N. Dabei sei H_{N+1} die Einschränkung von H auf den Knoten $\{N+1\}$ und H_N die Einschränkung von H auf die Knoten $\{1, \dots, N\}$. Aufgrund von Lemma A.2 können wir den Knoten $N+1$ so wählen, dass H_N zusammenhängend ist.

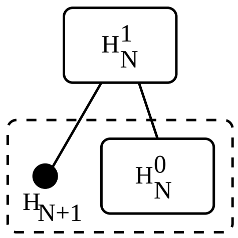


Wenn der Graph H_N nicht Heisenberg-integrabel ist, dann ist die 4er-Kette nach Voraussetzung ein Teilsystem von H_N und somit auch ein Teilsystem von H. Deswegen sei im folgenden der Graph H_N Heisenberg-integrabel.

Die Kopplung zwischen H_{N+1} und H_N ist nicht gleichförmig. Andernfalls wäre nach Satz 3.6 das Gesamtsystem H Heisenberg-integrabel. H_{N+1} und H_N sind auch nicht ungekoppelt, da H zusammenhängend ist. Wir zerlegen den Graphen H_N in ein Teilsystem H_N^0 ohne Kopplung zu H_{N+1} und in ein Teilsystem H_N^1 mit gleichförmiger Kopplung zu H_{N+1}. Nach Satz 3.8 sind beide Teilsysteme Heisenberg-integrabel.

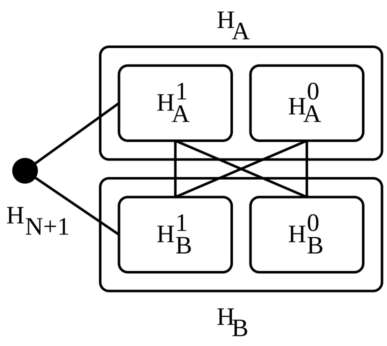


Wenn H_N ein N-Pantaeder wäre, dann würden sowohl H_{N+1} als auch H_N^0 gleichförmig mit H_N^1 koppeln. Da H_{N+1} und H_N^0 nach Konstruktion nicht koppeln, wäre nach Satz 3.6 das Gesamtsystem H Heisenberg-integrabel.

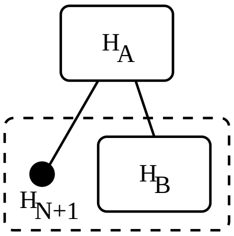


Also ist H_N kein N-Pantaeder und besitzt ein ungekoppeltes Knotenpaar.

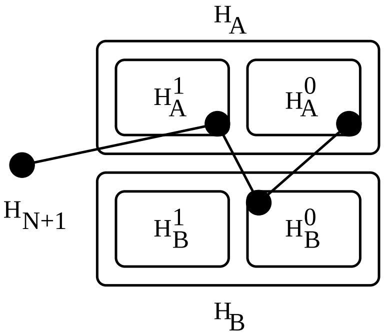
Nun zerlegen wir den Graphen H_N erneut. Nach Aussage von Satz 3.10 gibt es zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme H_A und H_B mit gleichförmiger Kopplung zwischen den Systemen. H_A und H_B sind Einschränkungen von H_N auf zwei disjunkte Mengen $A, B \subset \{1, \ldots, N\}$ mit $A \neq \emptyset$ und $B \neq \emptyset$. H_A wiederum zerlegen wir in ein Teilsystem H_A^0 ohne Kopplung zu H_{N+1} und in ein Teilsystem H_A^1 mit gleichförmiger Kopplung zu H_{N+1}. H_A^0 und H_A^1 sind Einschränkungen von H_A auf zwei disjunkte Mengen $A_0, A_1 \subseteq A$. Auf die gleiche Weise führen wir die Zerlegung von H_B durch. Da H_{N+1} und H_N weder gleichförmig gekoppelt noch ungekoppelt sind, gilt $A_0 \cup B_0 \neq \emptyset$ und $A_1 \cup B_1 \neq \emptyset$.



Sei nun $A_0 = \emptyset$. Dann koppelt sowohl H_{N+1} als auch H_B gleichförmig mit H_A. Da H_A Heisenberg-integrabel ist, das Gesamtsystem H aber nicht, ist nach Satz 3.6 die Einschränkung von H auf $\{N+1\} \cup B$ nicht Heisenberg-integrabel und enthält nach Voraussetzung die 4er-Kette. Dieselbe Überlegung gilt für $B_0 = \emptyset$.

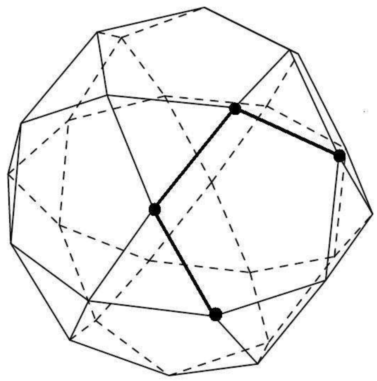


Sei nun $A_0 \neq \emptyset$ und $B_0 \neq \emptyset$. Der Graph H_N enthält ein ungekoppeltes Knotenpaar, also ein Paar (μ, ν) mit $J_{\mu\nu} = 0$. Aufgrund der Konstruktion muss $\mu \in A_0$, $\nu \in A_1$ oder $\mu \in B_0$, $\nu \in B_1$ gelten. ν ist mit $N + 1$ direkt und mit μ über einen Knoten $\lambda \in B_0$ bzw. $\lambda \in A_0$ gekoppelt. Damit haben wir eine 4er-Kette im Graphen H gefunden.



□

Aufgrund des Satzes enthalten alle Graphen, die nicht Heisenberg-integrabel sind, die 4er-Kette. Die Heisenberg-integrablen Graphen dagegen enthalten keine 4er-Kette, da alle Teilgraphen Heisenberg-integrabel sind. Aus diesem Grund können wir auf einfache Art und Weise entscheiden, ob ein Graph Heisenberg-integrabel ist oder nicht. Weil ein klassisches Heisenberg-System mit N Spins $\binom{N}{4}$ Teilsysteme besitzt, ist der Aufwand für die Suche nach einer 4er-Kette polynomiell: $\mathcal{O}(N^4)$. Ein Verfahren, das $N - 1$ unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten sucht, ist erheblich aufwendiger.
Der sogenannte *Ikosidodekaeder* gehört zu den archimedischen Körpern und besteht aus 20 gleichseitigen Dreiecken und 12 regulären Fünfecken. Trotz der komplexen Struktur lässt sich in diesem 30-Spin-System auf einen Blick eine 4er-Kette ausmachen. Somit ist der Ikosidodekaeder ein Beispiel für ein komplexes System, das nicht Heisenberg-integrabel ist.



3.7.3 Zeitentwicklung

Die gleichförmige Zerlegung von Heisenberg-integrablen Graphen ermöglicht die explizite Angabe der Zeitentwicklung. Der Zustand $\vec{s}_\mu(t)$ entwickelt sich über ein Produkt von Drehmatrizen aus dem Anfangszustand $\vec{s}_\mu(0)$. Diese Matrizen ergeben sich aus den Anfangsbedingungen $\vec{s}_1(0), \ldots, \vec{s}_N(0)$ und der Kopplungsmatrix $\mathbb{J}$.

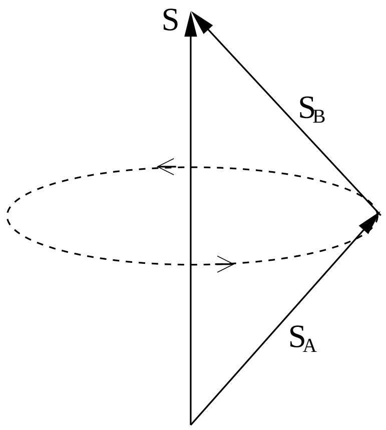
Definition *Die Matrix $\mathbb{D}(\vec{\omega}, t)$ beschreibt die Drehung um die Achse $\vec{\omega}$ mit dem Winkel $|\vec{\omega}|\, t$. $\mathbb{D}(\vec{0}, t)$ ist die identische Abbildung $\mathbb{I}$.*

Bevor wir die Drehachsen $\vec{\omega}$ angeben können, sind einige Vorüberlegungen notwendig. Zunächst betrachten wir den Gesamtspin $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ von zwei klassischen Heisenberg-Systemen H_A und H_B. In den beiden Systemen sind $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ erhalten. Wenn H_A und H_B miteinander koppeln, dann sind $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ nicht mehr erhalten, sondern zeitabhängig. Ist die Kopplung H_{AB} gleichförmig, so entwickeln sich die Zustände $\vec{S}_A(t)$ und $\vec{S}_B(t)$ über eine Drehmatrix aus den Anfangszuständen $\vec{S}_A(0)$ und $\vec{S}_B(0)$.

Lemma 3.13 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Zudem seien H_A und H_B eine Zerlegung von H mit keiner oder gleichförmiger Kopplung der Stärke c_{AB} zwischen den Teilsystemen. Dann sind*

$$\vec{S}_A(t) = \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}, t)\; \vec{S}_A(0) \quad \text{und} \quad \vec{S}_B(t) = \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}, t)\; \vec{S}_B(0) \tag{76}$$

die Zeitentwicklungen der Gesamtspins $\vec{S}_A$ von H_A und $\vec{S}_B$ von H_B. Sind die Teilsysteme ungekoppelt ($c_{AB} = 0$), dann sind $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ konstant. Koppeln H_A und H_B gleichförmig ($c_{AB} \neq 0$), dann präzedieren $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ gegenläufig um den konstanten Gesamtspin $\vec{S}$ mit der Winkelgeschwindigkeit $c_{AB}S$.



Beweis
H sei ein klassisches Heisenberg-System. H_A und H_B seien eine Zerlegung von H mit keiner oder gleichförmiger Kopplung zwischen den Teilsystemen. Also gilt:

$$H = H_A + H_B + \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2) \quad \text{mit} \quad c_{AB} \in \mathbb{R} \tag{77}$$

Wir betrachten die Poisson-Klammer zwischen dem Gesamtspin $\vec{S}_A$ von H_A und der Hamilton-Funktion H. Da $\vec{S}_A$ mit H_A, H_B, S_A^2 und S_B^2 vertauscht, erhalten wir

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{S}}_A &= \{\vec{S}_A, H\} && \text{(78 a)}\\
&= \{\vec{S}_A, H_A + H_B + \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2)\} && \text{(78 b)}\\
&= \frac{c_{AB}}{2}\,\{\vec{S}_A, S^2 - S_A^2 - S_B^2\} && \text{(78 c)}\\
&= \frac{c_{AB}}{2}\,\{\vec{S}_A, S^2\}. && \text{(78 d)}
\end{aligned}$$

Die Poisson-Klammer zwischen $\vec{S}_A$ und S^2 können wir unter Verwendung der Bewegungsgleichungen für $\vec{s}_\mu$ weiter umformen.

$$\{\vec{S}_A, S^2\} = \sum_{\mu\,\in\,A} \{\vec{s}_\mu, S^2\} = \sum_{\mu\,\in\,A} \underbrace{\frac{\partial S^2}{\partial \vec{s}_\mu}}_{2\,(\vec{S}-\vec{s}_\mu)} \times \vec{s}_\mu = 2\,\vec{S} \times \vec{S}_A \tag{79}$$

Also präzediert $\vec{S}_A$ um den Gesamtspin $\vec{S}$ mit der Winkelgeschwindigkeit

$c_{AB}S$. Entsprechendes gilt für $\vec{S}_B$.

$$\vec{S}_A(t) = \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}, t)\ \vec{S}_A(0) \quad \text{und} \quad \vec{S}_B(t) = \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}, t)\ \vec{S}_B(0) \tag{80}$$

Aus $\vec{S} = \vec{S}_A + \vec{S}_B$ folgt $\vec{S} \times \vec{S}_A = -\vec{S} \times \vec{S}_B$ und damit $\dot{\vec{S}}_A = -\dot{\vec{S}}_B$. Aus diesem Grund sind die Präzessionen von $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ gegenläufig. □

Bevor wir aus dem Lemma die Drehachsen $\vec{\omega}$ in der Zeitentwicklung $\vec{s}_\mu(t)$ ableiten können, ist eine weitere Vorüberlegung notwendig. Die Menge der Heisenberg-integrablen Graphen lässt sich über die gleichförmige Kopplung iterativ erzeugen. Zu jedem Heisenberg-integrablen Graphen H mit N Spins benötigen wir die Information, wie sich H durch die gleichförmige Kopplung aus N 1-Spin-Systemen erzeugen lässt.

Definition *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Eine Menge $\mathcal{B}_H$ mit den Eigenschaften*

1. $\mathcal{B}_H \subset \mathcal{P}(\{1, \ldots, N\})$
2. $\emptyset \notin \mathcal{B}_H$ *und* $\{1, \ldots, N\} \in \mathcal{B}_H$
3. *Für alle* $M_1, M_2 \in \mathcal{B}_H$ *gilt* $M_1 \cap M_2 = \emptyset$, $M_1 \subseteq M_2$ *oder* $M_1 \supseteq M_2$.
4. *Für alle* $M \in \mathcal{B}_H$ *mit* $|M| > 1$ *gibt es* $M_1, M_2 \in \mathcal{B}_H$ *mit* $M_1 \cap M_2 = \emptyset$, $M = M_1 \cup M_2$ *und* $J_{\mu\nu} = c \in \mathbb{R}$ *für alle* $\mu \in M_1$ *und* $\nu \in M_2$.

heißt Konstruktionsbaum *von H. Die Menge $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H) = \{M \in \mathcal{B}_H \mid \mu \in M\}$ heißt* Konstruktionspfad *von μ im Baum $\mathcal{B}_H$.*

Anschaulich lässt sich die Menge $\mathcal{B}_H$ als binärer Teilmengenbaum auffassen. Aufgrund von Punkt 1 sind die Knoten von $\mathcal{B}_H$ Mengen mit den Elementen $1, \ldots, N$. Jeder Knoten von $\mathcal{B}_H$ repräsentiert ein Teilsystem des zugehörigen klassischen Heisenberg-Systems H. Punkt 2 legt die Wurzel des Baumes, die Menge $\{1, \ldots, N\}$, fest. Punkt 4 gewährleistet, dass jeder Knoten von $\mathcal{B}_H$ mit mindestens 2 Elementen zwei disjunkte Söhne besitzt, deren Vereinigung den Vater ergibt. Außerdem realisiert Punkt 4 die gleichförmige Kopplung der zugehörigen Teilsysteme. Aufgrund von Punkt 3 gibt es genau zwei Söhne. Die Mengen $\{1\}, \ldots, \{N\}$ sind die Blätter des Baumes.
Die Teilmenge $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H)$ enthält diejenigen Mengen von $\mathcal{B}_H$, die das Element μ enthalten. Aufgrund von Punkt 3 lassen sich diese Mengen nach der Zahl der Elemente ordnen. Anschaulich lässt sich $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H)$ als Pfad vom Blatt $\{\mu\}$ zur Wurzel $\{1, \ldots, N\}$ deuten.

Jeder Heisenberg-integrable Graph H besitzt einen Konstruktionsbaum $\mathcal{B}_H$. Wie wir am Beispiel der Pantaeder gesehen haben, ist die Zerlegung von H in gleichförmig gekoppelte Teilsysteme nicht eindeutig. Deswegen ist $\mathcal{B}_H$ im allgemeinen auch nicht eindeutig. Für die Angabe der Drehachsen $\vec{\omega}$ in der Zeitentwicklung $\vec{s}_\mu(t)$ reicht es aus, dass in einem gegebenen Baum $\mathcal{B}_H$ der Konstruktionspfad $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H)$ eindeutig ist.

Definition

$$\prod_{i=1}^{\rightarrow K} \mathbb{M}_i \equiv \begin{cases} \mathbb{M}_1 \, \mathbb{M}_2 \ldots \mathbb{M}_K & \text{für } K \geq 1 \\ \mathbb{I} & \text{für } K < 1 \end{cases} \tag{81}$$

Satz 3.14 *H sei ein klassisches Heisenberg-System. Weiterhin habe H einen Konstruktionsbaum $\mathcal{B}_H$. Dann ist*

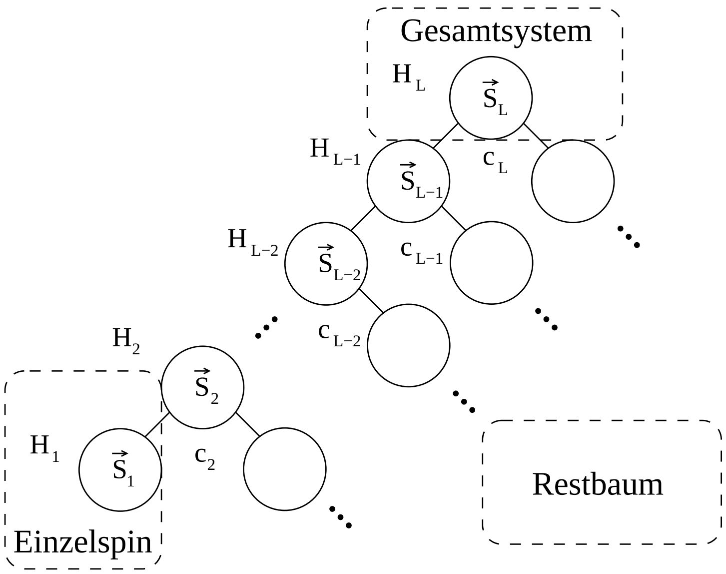
$$\vec{s}_\mu(t) = \mathbb{D}\left(c_L \vec{S}_L(0), t\right) \left(\prod_{i=1}^{\rightarrow L-2} \mathbb{D}\left((c_{L-i} - c_{L+1-i})\vec{S}_{L-i}(0), t\right)\right) \vec{S}_1(0) \tag{82}$$

die Zeitentwicklung für alle $\mu \leq N$. Der Konstruktionspfad

$$\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H) = \{M_1, M_2, \ldots, M_L\} \quad \text{mit} \quad M_1 \subset M_2 \subset \ldots \subset M_L \tag{83}$$

legt die Kopplungsstärke c_i und den Gesamtspin $\vec{S}_i$ fest.

$$\vec{S}_i(0) = \sum_{\mu \in M_i} \vec{s}_\mu(0) \quad \text{und} \quad c_i = J_{\mu\nu} \quad \text{mit} \quad \mu \in M_{i-1}, \nu \in M_i \setminus M_{i-1} \tag{84}$$



Beweis
Der Beweis des Satzes 3.14 erfolgt durch vollständige Induktion über die Zahl N der Spins.

Verankerung: In einem System, das aus einem einzelnen Spin $\vec{s}_1$ besteht, gilt $H = 0$ und somit $\dot{\vec{s}}_1 = \{\vec{s}_1, H\} = 0$. Folglich ist die Zeitentwicklung $\vec{s}_1(t) = \vec{s}_1(0)$. Obwohl diese Verankerung für den folgenden Induktionsbeweis ausreicht, geben wir an dieser Stelle auch die Zeitentwicklung des Spin-Dimer $H = J\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ an. Nach Aussage von Lemma 3.13 gilt

$$\vec{s}_1(t) = \mathbb{D}(J\vec{S}, t)\,\vec{s}_1(0) \quad \text{und} \quad \vec{s}_2(t) = \mathbb{D}(J\vec{S}, t)\,\vec{s}_2(0). \tag{85}$$

Dieses Ergebnis stimmt mit der Aussage von Satz 3.14 überein: Der Baum $\mathcal{B}_H = \{\{1\}, \{2\}, \{1,2\}\}$ hat die zwei Pfade $\mathcal{P}_1(\mathcal{B}_H) = \{\{1\}, \{1,2\}\}$ und $\mathcal{P}_2(\mathcal{B}_H) = \{\{2\}, \{1,2\}\}$. Diese beiden Pfade haben die Länge $L = 2$ und liefern denselben Gesamtspin $\vec{S}_2 = \vec{S}$ und dieselbe Kopplungsstärke $c_2 = J$.

Voraussetzung: Der Satz 3.14 ist gültig für klassische Heisenberg-Systeme mit N Spins.

Schritt: H sei ein klassisches Heisenberg-System mit $N+1$ Spins und habe einen Baum $\mathcal{B}_H$. Wir bezeichnen mit A und B die beiden (disjunkten) Söhne der Wurzel $W = \{1, \ldots, N+1\}$. Aufgrund der Definition des Baumes sind A und B die Wurzeln von zwei (disjunkten) Teilbäumen $\mathcal{B}_{H_A}$ und $\mathcal{B}_{H_B}$. Für diese Teilbäume gilt $\mathcal{B}_H = \mathcal{B}_{H_A} \cup \mathcal{B}_{H_B} \cup W$. Also ist $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H) = \mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_{H_A}) \cup W$ für $\mu \in A$ und $\mathcal{P}_\nu(\mathcal{B}_H) = \mathcal{P}_\nu(\mathcal{B}_{H_B}) \cup W$ für $\nu \in B$. Außerdem gilt

$$H = H_A + H_B + \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2) \quad \text{mit} \quad c_{AB} \in \mathbb{R}. \tag{86}$$

Für $\mu \in A$ enthalten H_B und S_B^2 keine Terme mit $\vec{s}_\mu$ und wir erhalten die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{s}}_\mu &= \{\vec{s}_\mu, H\} = \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu && \text{(87 a)}\\
&= \frac{\partial}{\partial \vec{s}_\mu}\left(H_A + H_B + \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2 - S_B^2)\right) \times \vec{s}_\mu && \text{(87 b)}\\
&= \frac{\partial}{\partial \vec{s}_\mu}\left(H_A + \frac{c_{AB}}{2}\,(S^2 - S_A^2)\right) \times \vec{s}_\mu. && \text{(87 c)}
\end{aligned}$$

Aufgrund von $\partial/\partial\vec{s}_\mu\, S^2 = 2\,(\vec{S} - \vec{s}_\mu)$ und $\partial/\partial\vec{s}_\mu\, S_A^2 = 2\,(\vec{S}_A - \vec{s}_\mu)$ gilt

$$\dot{\vec{s}}_\mu = \left(\frac{\partial H_A}{\partial \vec{s}_\mu} + c_{AB}\vec{S}_B\right) \times \vec{s}_\mu. \tag{88}$$

Für die Beweisführung ist der Fall $\mu \in A$ ausreichend. Für das bessere Verständnis betrachten wir im folgenden auch den Fall $\nu \in B$. Dieselbe Rechnung liefert die Bewegungsgleichung

$$\dot{\vec{s}}_\nu = \left(\frac{\partial H_B}{\partial \vec{s}_\nu} + c_{AB}\vec{S}_A\right) \times \vec{s}_\nu. \tag{89}$$

Aufgrund von Lemma 3.13 sind $\vec{S}_A$ und $\vec{S}_B$ zeitabhängig und präzedieren um den Gesamtspin $\vec{S}$. Aus diesem Grund führen wir die Transformation $\vec{r}_\lambda \equiv \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \vec{s}_\lambda$ für alle $\lambda \leq N+1$ durch. In diesem System ist

$$\begin{aligned} \vec{R}_A &\equiv \sum_{\mu \in A} \vec{r}_\mu = \sum_{\mu \in A} \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \vec{s}_\mu = \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t) \sum_{\mu \in A} \vec{s}_\mu && \text{(90 a)} \\ &= \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \vec{S}_A = \underbrace{\mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}, t)}_{\mathbb{I}}\, \vec{S}_A(0) && \text{(90 b)} \end{aligned}$$

und $\vec{R}_B = \vec{S}_B(0)$. Wir benötigen nun die Bewegungsgleichungen für $\vec{r}_\lambda$. Dazu differenzieren wir $\vec{r}_\lambda = \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)$ nach der Zeit t.

$$\dot{\vec{r}}_\lambda = -c_{AB}\vec{S} \times \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \vec{s}_\lambda + \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\, \dot{\vec{s}}_\lambda \tag{91}$$

$\dot{\vec{s}}_\lambda$ können wir durch die bekannten Bewegungsgleichungen für $\vec{s}_\lambda$ ersetzen. Für $\mu \in A$ erhalten wir die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}}_\mu &= -c_{AB}\vec{S} \times \vec{r}_\mu + \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t) \left(\left(\frac{\partial H_A}{\partial \vec{s}_\mu} + c_{AB}\vec{S}_B\right) \times \vec{s}_\mu\right) && \text{(92 a)} \\ &= -c_{AB}\vec{S} \times \vec{r}_\mu + \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t) \left(\frac{\partial H_A}{\partial \vec{s}_\mu} + c_{AB}\vec{S}_B\right) \times \vec{r}_\mu && \text{(92 b)} \\ &= -c_{AB}\vec{S} \times \vec{r}_\mu + \nabla_\mu H_A(r) \times \vec{r}_\mu + c_{AB}\vec{R}_B \times \vec{r}_\mu && \text{(92 c)} \\ &= \left(\nabla_\mu H_A(r) - c_{AB}\vec{R}_A\right) \times \vec{r}_\mu && \text{(92 d)} \end{aligned}$$

und für $\nu \in B$ die entsprechende Bewegungsgleichung

$$\dot{\vec{r}}_\nu = \left(\nabla_\nu H_B(r) - c_{AB}\vec{R}_B\right) \times \vec{r}_\nu. \tag{93}$$

In der Rechnung haben wir eine neue Schreibweise eingeführt. Wir fassen $\partial H/\partial\vec{s}_\lambda$ als Gradient auf und bezeichnen mit $\nabla_\lambda H(s)$ den Gradienten von H bezüglich $\vec{s}_\lambda$ an der Stelle $s \in \mathcal{P}_H$. Da H die Hamilton-Funktion eines klassischen Heisenberg-Systems ist, gilt

$$\nabla_\lambda H(s) = \frac{\partial}{\partial\vec{s}_\lambda} \sum_{\mu<\nu} J_{\mu\nu}\,\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu = \sum_{\mu\neq\lambda} J_{\mu\lambda}\,\vec{s}_\mu. \tag{94}$$

Deswegen stimmen der Gradient $\nabla_\lambda H(r)$ an der gedrehten Stelle $r \in \mathcal{P}_H$ und der gedrehte Gradient $\mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\,\nabla_\lambda H(s)$ an der Stelle $s \in \mathcal{P}_H$ überein.

$$\begin{aligned}
\nabla_\lambda H(r) &= \sum_{\mu\neq\lambda} J_{\mu\lambda}\,\vec{r}_\mu && \text{(95 a)}\\
&= \sum_{\mu\neq\lambda} J_{\mu\lambda}\,\mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\vec{s}_\mu && \text{(95 b)}\\
&= \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t) \sum_{\mu\neq\lambda} J_{\mu\lambda}\,\vec{s}_\mu && \text{(95 c)}\\
&= \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}, t)\,\nabla_\lambda H(s) && \text{(95 d)}
\end{aligned}$$

Wir führen nun die Transformation $\vec{k}_\mu \equiv \mathbb{D}(c_{AB}\,\vec{R}_A, t)\,\vec{r}_\mu$ für alle $\mu \in A$ und $\vec{k}_\nu \equiv \mathbb{D}(c_{AB}\,\vec{R}_B, t)\,\vec{r}_\nu$ für alle $\nu \in B$ durch. Diese Transformation liefert zum einen die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{k}}_\mu &= c_{AB}\vec{R}_A \times \mathbb{D}(c_{AB}\vec{R}_A, t)\,\vec{r}_\mu + \mathbb{D}(c_{AB}\vec{R}_A, t)\,\dot{\vec{r}}_\mu && \text{(96 a)}\\
&= c_{AB}\vec{R}_A \times \vec{k}_\mu + \mathbb{D}(c_{AB}\vec{R}_A, t)\left(\left(\nabla_\mu H_A(r) - c_{AB}\vec{R}_A\right) \times \vec{r}_\mu\right) && \text{(96 b)}\\
&= c_{AB}\vec{R}_A \times \vec{k}_\mu + \mathbb{D}(c_{AB}\vec{R}_A, t)\left(\nabla_\mu H_A(r) - c_{AB}\vec{R}_A\right) \times \vec{k}_\mu && \text{(96 c)}\\
&= c_{AB}\vec{R}_A \times \vec{k}_\mu + \nabla_\mu H_A(k) \times \vec{k}_\mu - c_{AB}\vec{R}_A \times \vec{k}_\mu && \text{(96 d)}\\
&= \nabla_\mu H_A(k) \times \vec{k}_\mu && \text{(96 e)}
\end{aligned}$$

und zum anderen die Differentialgleichung

$$\dot{\vec{k}}_\nu = \nabla_\nu H_B(k) \times \vec{k}_\nu. \tag{97}$$

Nach Voraussetzung sind für dieses System von Differentialgleichungen die Lösungen $\vec{k}_\lambda$ bekannt für alle $\lambda \le N+1$.

$$\vec{k}_\lambda(t) = \mathbb{D}\left(c_L \vec{K}_L(0), t\right) \left(\prod_{i=1}^{\rightarrow L-2} \mathbb{D}\left((c_{L-i} - c_{L+1-i})\vec{K}_{L-i}(0), t\right)\right) \vec{K}_1(0) \tag{98}$$

Die entsprechenden Rücktransformationen liefern die Lösungen $\vec{s}_\lambda$ für das ursprüngliche System von Differentialgleichungen.

$$\vec{s}_\mu(t) \;=\; \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}(0), t)\, \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}_A(0), t)\, \vec{k}_\mu(t) \quad \text{und} \tag{99 a}$$

$$\vec{s}_\nu(t) \;=\; \mathbb{D}(c_{AB}\vec{S}(0), t)\, \mathbb{D}(-c_{AB}\vec{S}_B(0), t)\, \vec{k}_\nu(t). \tag{99 b}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist noch keine Drehung erfolgt. Aus diesem Grund stimmen die Anfangsbedingungen $\vec{K}_i(0)$ und $\vec{S}_i(0)$ überein. Aufgrund der Konstruktion gilt $\vec{S}_{L+1}(0) = \vec{S}(0)$, $c_{L+1} = c_{AB}$ und $\vec{S}_L = \vec{S}_A$ bzw. $\vec{S}_L = \vec{S}_B$. Wir setzen $M = L+1$ und erhalten die Lösung

$$\vec{s}_\lambda(t) = \mathbb{D}\left(c_M \vec{S}_M(0), t\right) \left(\prod_{i=1}^{\rightarrow M-2} \mathbb{D}\left((c_{M-i} - c_{M+1-i})\vec{S}_{M-i}(0), t\right)\right) \vec{S}_1(0) \tag{100}$$

für alle $\lambda \le N+1$. $\square$

Nun wenden wir den Satz auf ein einfaches Beispiel an. Dazu betrachten wir einen N-Pantaeder $H = J/2\,(S^2 - N)$. Ein möglicher Konstruktionsbaum von H ist die Menge

$$\mathcal{B}_H = \{\{1, \ldots, N\}, \{1, \ldots, N-1\}, \ldots, \{1, 2\}, \{1\}, \{2\}, \ldots, \{N\}\}. \tag{101}$$

Der zugehörige Konstruktionspfad ist die Teilmenge

$$\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H) = \{\underbrace{\{1, \ldots, N\}}_{M_L}, \underbrace{\{1, \ldots, N-1\}}_{M_{L-1}}, \ldots, \underbrace{\{1, \ldots, \mu\}}_{M_2}, \underbrace{\{\mu\}}_{M_1}\}. \tag{102}$$

Da die Kopplungstärken $J_{\mu\nu}$ für alle $\mu < \nu \le N$ übereinstimmen, gilt $c_i = J$

für alle $i \leq L$. Deswegen lässt sich die Zeitentwicklung $\vec{s}_\mu(t)$ über eine einzige Drehmatrix ausdrücken.

$$\vec{s}_\mu(t) = \mathbb{D}\left(c_L \vec{S}_L(0), t\right) \underbrace{\left(\prod_{i=1}^{\rightarrow L-2} \mathbb{D}\left((c_{L-i} - c_{L+1-i})\vec{S}_{L-i}(0), t\right)\right)}_{\mathbb{I}} \vec{S}_1(0) \quad (103)$$

In jedem Konstruktionspfad $\mathcal{P}_\mu(\mathcal{B}_H)$ ist $M_L = \{1, \ldots, N\}$ und $M_1 = \{\mu\}$. Deswegen gilt $\vec{S}_L(0) = \vec{S}$ und $\vec{S}_1(0) = \vec{s}_\mu(0)$. Somit ist die Zeitentwicklung

$$\vec{s}_\mu(t) = \mathbb{D}(J\vec{S}, t)\, \vec{s}_\mu(0) \quad (104)$$

eine Präzession um den Gesamtspin $\vec{S}$ mit der Winkelgeschwindigkeit JS. Dieses Ergebnis können wir über eine kurze Rechnung bestätigen.

$$\begin{aligned} \vec{s}_\mu(t) &= \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu = \frac{\partial}{\partial \vec{s}_\mu}\left(\frac{J}{2}(S^2 - N)\right) \times \vec{s}_\mu = \frac{J}{2}\frac{\partial S^2}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu & (105\text{ a}) \\ &= J(\vec{S} - \vec{s}_\mu) \times \vec{s}_\mu = J\,\vec{S} \times \vec{s}_\mu & (105\text{ b}) \end{aligned}$$

Mit Hilfe des Satzes lässt sich das Problem, die Bewegungsgleichungen von Heisenberg-integrablen Graphen zu lösen, auf das Problem übertragen, einen Konstruktionsbaum zu finden. Mit Hilfe von Tabelle 1 können wir für alle Heisenberg-integrablen Graphen bis $N = 5$ Spins einen Konstruktionsbaum und somit die Zeitentwicklung angeben.

3.8 Äußeres Magnetfeld

Ein klassisches Heisenberg-System H_0 in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t)$ lässt sich durch eine Hamilton-Funktion H der Form

$$H = H_0 + \gamma\, \vec{B}(t) \cdot \vec{S} \quad (106)$$

beschreiben. Aufgrund des Zeeman-Terms $\gamma\, \vec{B}(t) \cdot \vec{S}$ ist die Integrabilität des Spin-Systems nicht nur von den Eigenschaften von H_0, sondern auch vom Magnetfeld $\vec{B}(t)$ abhängig. Für zeitabhängige Magnetfelder $\vec{B}(t)$ ist die Hamilton-Funktion $H(t)$ keine Erhaltungsgröße. Deswegen hängt bereits die Integrabilität eines 1-Spin-Systems vom zeitlichen Verlauf des Feldes ab. Ein einzelner Spin in einem rotierenden Magnetfeld $\vec{B}(t) = B(\cos\omega t, \sin\omega t, 0)$ ist beispielsweise integrabel [4]. Allerdings ist die Untersuchung zeitabhängiger Felder nicht Teil dieser Arbeit. Aus diesem Grund beschränken wir uns im folgenden auf konstante Magnetfelder $\vec{B}(t) = \vec{B}$.

Satz 3.15 *H sei ein klassisches Heisenberg-System H_0 in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t) = \vec{B}$. Die Zeitentwicklung von H lässt sich genau dann explizit angeben, wenn sich die Zeitentwicklung von H_0 explizit angeben lässt.*

Beweis
H sei ein klassisches Heisenberg-System H_0 in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t) = \vec{B}$. Wir betrachten die Poisson-Klammer zwischen dem Spin $\vec{s}_\mu$ und der Hamilton-Funktion $H = H_0 + \gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}$.

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{s}}_\mu &= \{\vec{s}_\mu, H\} = \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu && \text{(107 a)}\\
&= \frac{\partial}{\partial \vec{s}_\mu}\left(H_0 + \gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}\right) \times \vec{s}_\mu && \text{(107 b)}\\
&= \left(\frac{\partial H_0}{\partial \vec{s}_\mu} + \gamma\,\vec{B}\,\frac{\partial \vec{S}}{\partial \vec{s}_\mu}\right) \times \vec{s}_\mu && \text{(107 c)}
\end{aligned}$$

Aufgrund von $\partial/\,\partial\vec{s}_\mu\,\vec{S} = 1$ erhalten wir die Bewegungsgleichung

$$\dot{\vec{s}}_\mu = \left(\frac{\partial H_0}{\partial \vec{s}_\mu} + \gamma\,\vec{B}\right) \times \vec{s}_\mu. \tag{108}$$

Nun führen wir die Transformation $\vec{r}_\mu \equiv \mathbb{D}(-\gamma\,B, t)\,\vec{s}_\mu$ für alle $\mu \leq N$ durch. Diese Transformation liefert die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{r}}_\mu &= -\gamma\,\vec{B} \times \mathbb{D}(-\gamma\,B, t)\,\vec{s}_\mu + \mathbb{D}(-\gamma\,B, t)\,\dot{\vec{s}}_\mu && \text{(109 a)}\\
&= -\gamma\,\vec{B} \times \vec{r}_\mu + \mathbb{D}(-\gamma\,B, t)\left(\left(\frac{\partial H_0}{\partial \vec{s}_\mu} + \gamma\,\vec{B}\right) \times \vec{s}_\mu\right) && \text{(109 b)}\\
&= -\gamma\,\vec{B} \times \vec{r}_\mu + \mathbb{D}(-\gamma\,B, t)\left(\frac{\partial H_0}{\partial \vec{s}_\mu} + \gamma\,\vec{B}\right) \times \vec{r}_\mu && \text{(109 c)}\\
&= -\gamma\,\vec{B} \times \vec{r}_\mu + \nabla_\mu H_0(r) \times \vec{r}_\mu + \gamma\,\vec{B} \times \vec{r}_\mu && \text{(109 d)}\\
&= \nabla_\mu H_0(r) \times \vec{r}_\mu. && \text{(109 e)}
\end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung entspricht der Bewegungsgleichung für H_0. Ist $\vec{r}_\mu(t)$ die explizite Lösung, so erhalten wir mit Hilfe der Rücktransformation die explizite Lösung $\vec{s}_\mu(t) = \mathbb{D}(\gamma\,\vec{B}, t)\,\vec{r}_\mu(t)$ für H. Weil zum Zeitpunkt $t = 0$ noch keine Drehung erfolgt ist, stimmen die Anfangsbedingungen überein. □

Durch den Beweis des Satzes haben wir die Zeitentwicklung in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t) = \vec{B}$ hergeleitet. Ist $\vec{s}_\mu(t)$ die Zeitentwicklung für den Fall $B = 0$, so beschreibt $\mathbb{D}(\gamma\,\vec{B}, t)\,\vec{s}_\mu(t)$ die Bewegung für den Fall $B \neq 0$. Also erfolgt eine zusätzliche Drehung um $\vec{B}$ mit der Winkelgeschwindigkeit $\gamma\,B$. Jedoch hat die Anwesenheit eines konstanten Magnetfeldes keinen Einfluss auf die Heisenberg-Konstanten des Systems.

Satz 3.16 *H sei ein klassisches Heisenberg-System H_0 in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t) = \vec{B}$. H ist genau dann Heisenberg-integrabel, wenn H_0 Heisenberg-integrabel ist.*

Beweis
H_0 sei ein klassisches Heisenberg-System und befinde sich in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}(t) = \vec{B}$. Wir betrachten die Poisson-Klammer zwischen einer Heisenberg-Funktion E und der Hamilton-Funktion $H = H_0 + \gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}$.

$$
\begin{aligned}
\{E, H\} &= \{E, H_0 + \gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}\} && \text{(110 a)}\\
&= \{E, H_0\} + \{E, \gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}\} && \text{(110 b)}\\
&= \{E, H_0\} + \gamma\,\vec{B}\cdot\{E, \vec{S}\} && \text{(110 c)}
\end{aligned}
$$

Weil die Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ mit jeder Heisenberg-Funktion E vertauschen, gilt $\{E, H\} = \{E, H_0\}$. Also verschwindet die Poisson-Klammer zwischen E und H genau dann, wenn E und H_0 vertauschen. Folglich haben H und H_0 dieselben Heisenberg-Konstanten.
Für $\vec{B} \neq (0, 0, B)$ ist $S^{(3)}$ nicht erhalten. Wir können oBdA das $\vec{B}$-Feld in 3-Richtung legen oder den Zeeman-Term $\gamma\,\vec{B}\cdot\vec{S}$ als Erhaltungsgröße erster Ordnung wählen, die mit allen Heisenberg-Konstanten vertauscht. □

Aufgrund der beiden Sätze bleiben die Aussagen über Erhaltungsgrößen, Kopplung und Teilsysteme auch für klassische Heisenberg-Systeme in einem konstanten Magnetfeld $\vec{B}$ gültig. Insbesondere hat $\vec{B}$ keinen Einfluss auf die (Heisenberg-) Integrabilität. Deswegen müssen wir die Fälle $B = 0$ und $B \neq 0$ nicht getrennt voneinander betrachten.

3.9 Ljapunov-Exponent

Aufgrund des Liouvilleschen Satzes sind wir in der Lage, durch die Angabe von N unabhängigen, vertauschbaren Erhaltungsgrößen zu zeigen, dass ein klassisches Heisenberg-System integrabel ist. Allerdings stellt uns der Beweis des Gegenteils vor ein unlösbares Problem. Wie können wir ausschließen, dass es N *beliebige* Funktionen auf dem Phasenraum gibt, die unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen sind? Offensichtlich können wir mit dem Satz von Liouville nicht zeigen, dass ein klassisches Heisenberg-System nicht integrabel ist.

Einen Ausweg liefert die Tatsache, dass in einem integrablen System alle Phasenraum-Trajektorien regulär sind, während in einem nicht integrablen System chaotische Trajektorien möglich sind. Aus mathematischer Sicht tritt (deterministisches) Chaos in nicht-linearen dynamischen Systemen mit mehr als zwei Freiheitsgraden auf und bezeichnet die sensitive Abhängigkeit der Zeitentwicklung eines Systems von den Anfangsbedingungen [10]. Chaotisches Verhalten äußert sich in einem exponentiell schnellen Auseinanderdriften von Phasenraum-Trajektorien, die anfänglich nahe beieinander liegen. Deswegen führen kleine Unsicherheiten bei der Bestimmung der Anfangsbedingungen zu exponentiell großen Fehlern und das Langzeitverhalten des Systems ist nicht vorhersagbar (Schmetterlingseffekt).

Der sogenannte *Ljapunov-Exponent* misst die exponentielle Entfernung von zwei Phasenraum-Punkten im Laufe der Zeitentwicklung. Im Gegensatz zum Liouvilleschen Satz können wir mit dem Ljapunov-Exponenten numerische Untersuchungen zur Integrabilität von Systemen durchführen.

3.9.1 Definition

Zunächst geben wir die mathematische Definition des Ljapunov-Exponenten an. Dazu betrachten wir ein autonomes endlichdimensionales System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad x = (x_1, \ldots, x_n). \tag{111}$$

Die formale Lösung dieses Systems von Differentialgleichungen lautet

$$x(t) = A^t\, x_0 \quad \text{mit} \quad x_0 = x(0). \tag{112}$$

Die Abbildung A^t beschreibt die Zeitentwicklung für alle Phasenraum-Punkte. Wir nehmen an, dass die Lösung $x(t)$ beschränkt ist und für alle Zeiten t existiert. Weiterhin nehmen wir an, dass die Funktion f analytisch ist. Die

Differenz zwischen zwei infinitesimal benachbarten Punkten entwickelt sich gemäß [11, S.112] nach

$$\dot{\epsilon} = \frac{\partial f}{\partial x}(x(t))\,\epsilon. \tag{113}$$

$\partial f / \partial x\,(x(t))$ ist die Jacobimatrix $\partial f / \partial x$ am Punkt $x(t)$. Die formale Lösung dieses Systems von Variationsgleichungen lautet

$$\epsilon(t) = M^t_{x_0}\,\epsilon_0 \quad \text{mit} \quad \epsilon_0 = \epsilon(0). \tag{114}$$

Hierbei bezeichnet $M^t_{x_0}$ den Fluss von ϵ_0. Anschaulich beschreibt diese Matrix das asymptotische Verhalten von zwei infinitesimal benachbarten Punkten unter dem Fluss A^t für $t \to \infty$. Gemäß [10, S.41 f] sind die *eindimensionalen Ljapunov-Exponenten* definiert durch

$$\Lambda(x_0) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{||\,M^t_{x_0}\,e_i\,||}{||\,e_i\,||} \quad i = 1,\ldots,n. \tag{115}$$

$e_1,\ldots,e_n$ bezeichnet eine Basis des Tangentenraumes im Punkt x_0. $||\,e_i\,||$ ist die Norm von e_i bezüglich irgendeiner Riemannschen Metrik. Der Wert von $\Lambda(x_0)$ ist von dem Vektor e_i abhängig, der am Punkt x_0 im Phasenraum angeheftet ist. Für verschiedene Werte von e_i erhalten wir im allgemeinen verschiedene Werte für $\Lambda(x_0)$. Der größte Wert von $\Lambda(x_0)$ ist der *maximale eindimensionale Ljapunov-Exponent* Λ_{max}.
Wenn der Orbit $A^t\,x_0$ auf einen Fixpunkt zuläuft, dann ist $\Lambda_{max} < 0$ für alle Richtungen von e_i. Wenn $A^t\,x_0$ auf einen Grenzzyklus zuläuft, dann ist $\lambda_{max} = 0$. In diesem Fall hängt Λ_{max} nicht von der Richtung von e_i ab. Chaotisches Verhalten ist definiert für $\Lambda_{max} > 0$.
Da in konservativen Systemen die Volumen im Phasenraum konstant bleiben, haben diese Systeme im Gegensatz zu dissipativen Systemen keine Fixpunkte [11, S.181]. In konservativen Systemen gilt somit $\Lambda_{max} \geq 0$.

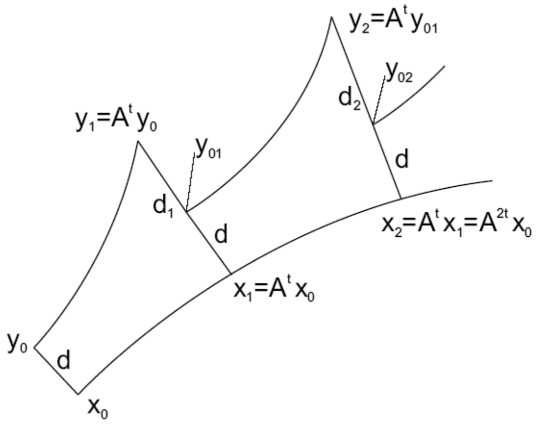
3.9.2 Numerische Berechnung

Nun geben wir ein mögliches Verfahren zur numerischen Berechnung des maximalen eindimensionalen Ljapunov-Exponenten Λ_{max} an. Wir betrachten zwei feste Punkte x_0 und y_0 im Phasenraum $\mathcal{P} = \mathbb{R}^n$, die durch folgende Eigenschaften gekennzeichnet sind [10, S.47 f]:

1. x_0 und y_0 sind benachbart, d.h. der Abstand d (euklidische Norm) zwischen beiden Punkten soll klein sein.

2. x_0 und y_0 dürfen nicht auf derselben Trajektorie liegen.

3. t ist ein hinreichend kleines Zeitintervall.



Wir betrachten die Entwicklung der Punkte x_0 und y_0 unter der numerischen Abbildung A^t. Sei $x_1 = A^t\, x_0$ und $y_1 = A^t\, y_0$. Diese beiden Punkte haben den Abstand

$$d_1 = ||x_1 - y_1|| = ||A^t\, x_0 - A^t\, y_0||. \tag{116}$$

Die numerische Berechung von Λ_{max} erfordert eine mehrfache Wiederholung dieser Abbildungen. Der Punkt x_{k+1} sei

$$x_{k+1} = A^t\, x_k = A^{2\,t}\, x_{k-1} = \ldots = A^{(k+1)\,t}\, x_0. \tag{117}$$

Um einen numerischen Überlauf zu verhindern, ist der neue Startpunkt y_{0k} wie folgt definiert: y_{0k} soll auf der Verbindungsgeraden liegen, die durch die beiden Punkte x_k und y_k verläuft, wobei der Abstand zwischen y_{0k} und x_k den Wert d haben soll. Auf den neu berechneten Startpunkt y_{0k} wenden wir die numerische Abbildung A^t an und erhalten

$$y_{k+1} = A^t\, y_{0k}. \tag{118}$$

Der Abstand d_{k+1} der beiden Phasenraum-Punkte x_{k+1} und y_{k+1} ist

$$d_{k+1} = ||x_{k+1} - y_{k+1}|| = ||A^t\, x_k - A^t\, y_{0k}||. \tag{119}$$

Die K-fache Anwendung dieses Verfahrens liefert eine Folge von Abständen

$d_1, \ldots, d_K$. Wir betrachten nun die Größe

$$\Lambda_K(x_0) = \frac{1}{Kt} \sum_{k=1}^{K} \ln\left(\frac{d_k}{d}\right). \tag{120}$$

Für $K \to \infty$ und $d \to 0$ geht diese Größe in die Definition von Λ_{max} über. Die Werte für K, d und t liegen in der Größenordnung $K = 10^5$, $d = 10^{-4}$ und $t = 10^{-1}$.

3.9.3 Geodäten

Im allgemeinen ist die kürzeste Verbindungskurve zwischen zwei Punkten im Phasenraum keine gerade Linie, sondern stattdessen ein Stück von einer *geodätischen Linie* [12, S.40]. Um das Verfahren zur numerischen Berechung von λ_{max} auf klassische Spin-Systeme übertragen zu können, bestimmen wir die geodätischen Linien im N-Spin-Phasenraum

$$\mathcal{P} = \{s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N) \,\text{mit}\, \vec{s}_\mu \in \mathbb{R}^3 \,\text{und}\, |\vec{s}_\mu| = 1 \,\text{für}\, \mu = 1, \ldots, N\}. \tag{121}$$

Wir wählen Kugelkoordinaten $x = (x_1, \ldots, x_{2N}) = (\varphi_1, \vartheta_1, \ldots, \varphi_N, \vartheta_N)$ mit $\varphi_\mu \in [0, 2\pi]$ und $\vartheta_\mu \in [0, \pi]$. Es gilt

$$\vec{s}_\mu = \begin{pmatrix} \cos\varphi_\mu \, \sin\vartheta_\mu \\ \sin\varphi_\mu \, \sin\vartheta_\mu \\ \cos\vartheta_\mu \end{pmatrix}. \tag{122}$$

Sei $\mathcal{C}(t) = (x_1(t), \ldots, x_{2N}(t))$ die Parameterdarstellung einer Kurve $\mathcal{C}$ im Phasenraum $\mathcal{P}$. Ist $\mathcal{C}$ eine geodätische Linie, dann erfüllt $\mathcal{C}(t)$ das System von Differentialgleichungen [12, S.96]

$$\frac{d^2x^\mu}{dt^2} + \Gamma^{\mu}_{\lambda\kappa} \frac{dx^\lambda}{dt}\frac{dx^\kappa}{dt} = 0 \quad \mu, \lambda, \kappa = 1, \ldots, 2\,N. \tag{123}$$

Gemäß der Einsteinschen Summenkonvention wird über die Indizes λ und κ summiert. Die *Christoffelschen Symbole* sind durch

$$\Gamma^{\mu}_{\lambda\kappa} = \frac{1}{2}\, g^{\mu\nu} \left(\frac{\partial g_{\lambda\nu}}{\partial x^\kappa} - \frac{\partial g_{\lambda\kappa}}{\partial x^\nu} + \frac{\partial g_{\nu\kappa}}{\partial x^\lambda}\right) \quad \nu = 1, \ldots, 2\,N \tag{124}$$

definiert. Über den Index ν wird summiert. Mit Hilfe der Beziehung

$$g_{\mu\nu}(x) = \frac{\partial s}{\partial x^\mu} \cdot \frac{\partial s}{\partial x^\nu} \tag{125}$$

erhalten wir nach einer kurzen Rechnung den *metrischen Tensor*

$$g(x) = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & g_N \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad g_\mu = \begin{pmatrix} \sin\vartheta_\mu & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{126}$$

Es gilt $g_{\mu\nu} = 0$ für $\mu \neq \nu$. Deswegen verschwindet in der Definition von $\Gamma^\mu_{\lambda\kappa}$ die Summation über ν. Sei $\mu \in \{2\,i-1, 2\,i\}$, λ und/oder $\kappa \notin \{2\,i-1, 2\,i\}$ für ein festes $i \in \{1, \ldots, N\}$. Dann ist $\partial g_{\lambda\mu}/\,\partial x^\kappa = \partial g_{\lambda\kappa}/\,\partial x^\mu = \partial g_{\mu\kappa}/\,\partial x^\lambda = 0$ und folglich $\Gamma^\mu_{\lambda\kappa} = 0$. Wir erhalten

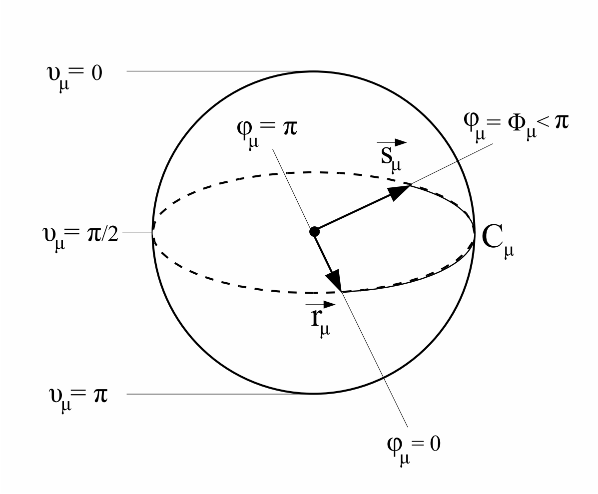
$$\frac{d^2x^\mu}{dt^2} + \Gamma^\mu_{\lambda\kappa}\frac{dx^\lambda}{dt}\frac{dx^\kappa}{dt} = 0 \quad \mu, \lambda, \kappa = 2\,i-1, 2\,i. \tag{127}$$

Das Differentialgleichungssystem für die Kurve $\mathcal{C}(t) = (x_1(t), \ldots, x_{2N}(t))$ im Produktraum besteht aus N ungekoppelten Differentialgleichungssystemen für die Kurven $\mathcal{C}_i(t) = (x_{2\,i-1}(t), x_{2\,i}(t))$ in den 1-Spin-Phasenräumen. Also ist $\mathcal{C} = (\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_N)$ eine geodätische Linie im Produktraum, wenn $\mathcal{C}_1, \ldots, \mathcal{C}_N$ geodätische Linien in den 1-Spin-Phasenräumen sind. Bekanntlich ist die kürzeste Verbindungskurve zwischen zwei Punkten auf der Kugeloberfläche eine Linie entlang des Großkreises durch diese beiden Punkte.
Die Länge $L(\mathcal{C})$ eines durch t parametrisierten Kurvenstückes $\mathcal{C}$ ist durch

$$L(\mathcal{C}) = \int_{t_0}^{t_1} \sqrt{g_{\mu\nu}(x)\frac{dx^\mu}{dt}\frac{dx^\nu}{dt}}\,dt \quad \mu, \nu = 1, \ldots, 2\,N \tag{128}$$

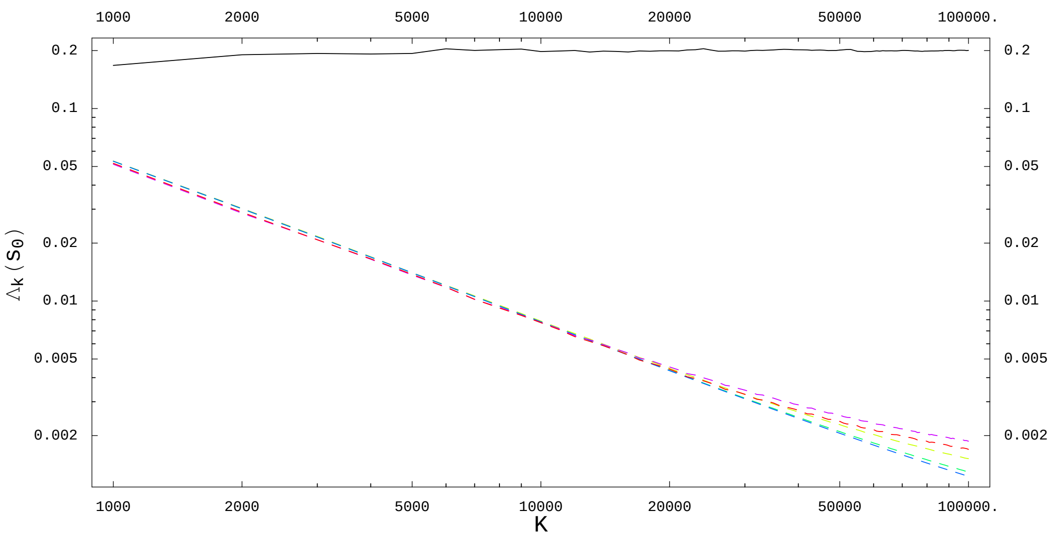
definiert [12, S.92]. Über die Indizes μ und ν wird summiert. Der metrische Tensor $g(x)$ gewährleistet, dass $L(\mathcal{C})$ weder vom Koordinatensystem x noch von der Parameterdarstellung $\mathcal{C}(t)$ abhängig ist.
Wir parametrisieren die kürzeste Verbindungskurve $\mathcal{C}$ zwischen den zwei Punkten $r = (\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N)$ und $s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N)$ durch $t \in [0, 1]$, $\varphi_\mu = t\,\phi_\mu$ und $\vartheta_\mu = \pi/2$. Mit dieser Wahl legen wir die Großkreise durch die Punkte $\vec{r}_\mu$ und $\vec{s}_\mu$ in die Äquatorebene. Nach einer kurzen Rechnung erhalten wir

$$d(r, s) = \sqrt{\sum_{\mu=1}^{N} \phi_\mu^2} \quad \text{mit} \quad \phi_\mu = \arccos(\vec{r}_\mu \cdot \vec{s}_\mu). \tag{129}$$



3.9.4 Ergebnisse

In der nachfolgenden Abbildung ist das Ergebnis einer numerischen Rechnung für die Heisenberg-Graphen mit $N = 4$ Spins dargestellt. Aufgetragen ist der (approximative) maximale eindimensionale Ljapunov-Exponent $\Lambda_K(s_0)$ in Abhängigkeit von der Zahl K der Rechenschritte. Die Anfangspunkte s_0 (und $r_0 = s_0+\epsilon$) sind zufällig und für alle Graphen übereinstimmend gewählt. Die durchgezogene (schwarze) Linie ist das Ergebnis für die 4er-Kette, die gestrichelten (farbigen) Linien sind die Ergebnisse für die 5 verbleibenden Heisenberg-Graphen mit $N = 4$ Spins.



Die 4er-Kette zeigt für den zufällig gewählten Anfangspunkt s_0 einen rasch konvergierenden und deutlich positiven Ljapunov-Exponenten $\Lambda_K(s_0)$. Dies bedeutet ein exponentiell schnelles Auseinanderdriften der anfänglich nahe beieinander liegenden Phasenraum-Punkte s_0 und r_0. Die Trajektorien sind also chaotisch. Da chaotisches Verhalten nur in nicht integrablen Systemen auftritt, können wir mit hoher Sicherheit vermuten, dass die 4er-Kette nicht integrabel ist. Zuvor konnten wir lediglich nachweisen, dass es sich bei der 4er-Kette um ein nicht Heisenberg-integrables System handelt.
Für denselben Startpunkt s_0 zeigen die 5 verbleibenden Heisenberg-Graphen mit $N = 4$ Spins Ljapunov-Exponenten $\Lambda_K(s_0)$, die entlang einer Hyperbel zu Null zerfallen (in doppelt logarithmischer Darstellung eine Gerade mit der Steigung $m = -1$). Entsprechend der Definition

$$\Lambda_K(s_0) = \frac{1}{Kt} \sum_{k=1}^{K} \ln\left(\frac{d_k}{d}\right) \tag{130}$$

ist dies der Fall, wenn sich die Abstände benachbarter Phasenraum-Punkte s_k und r_k während der Zeitentwicklung nicht mehr ändern und somit die Summe der Logarithmen im Laufe des Mittelungsprozesses konstant bleibt. Die Trajektorien sind also regulär. Da in nicht integrablen Systemen reguläre Phasenraum-Trajektorien möglich sind, können wir ohne das Vorwissen, dass die 5 Graphen Heisenberg-integrabel sind, nicht schlussfolgern, dass diese Systeme integrabel sind.
Dies können wir uns am Beispiel der 4er-Kette veranschaulichen. Zu diesem Zweck betrachten wir die Hamilton-Funktion $H = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_4$ und bestimmen über $\dot{\vec{s}}_\mu = \partial H / \partial \vec{s}_\mu \times \vec{s}_\mu$ die Bewegungsgleichungen

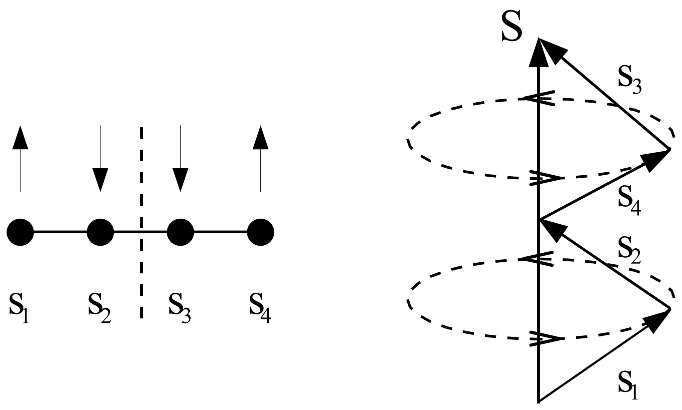
$$\dot{\vec{s}}_1 = \vec{s}_2 \times \vec{s}_1 \tag{131 a}$$
$$\dot{\vec{s}}_2 = (\vec{s}_1 + \vec{s}_3) \times \vec{s}_2 \tag{131 b}$$
$$\dot{\vec{s}}_3 = (\vec{s}_2 + \vec{s}_4) \times \vec{s}_3 \tag{131 c}$$
$$\dot{\vec{s}}_4 = \vec{s}_3 \times \vec{s}_4. \tag{131 d}$$

Für symmetrische Anfangsbedingungen $\vec{s}_1(0) = \vec{s}_4(0)$ und $\vec{s}_2(0) = \vec{s}_3(0)$ gilt

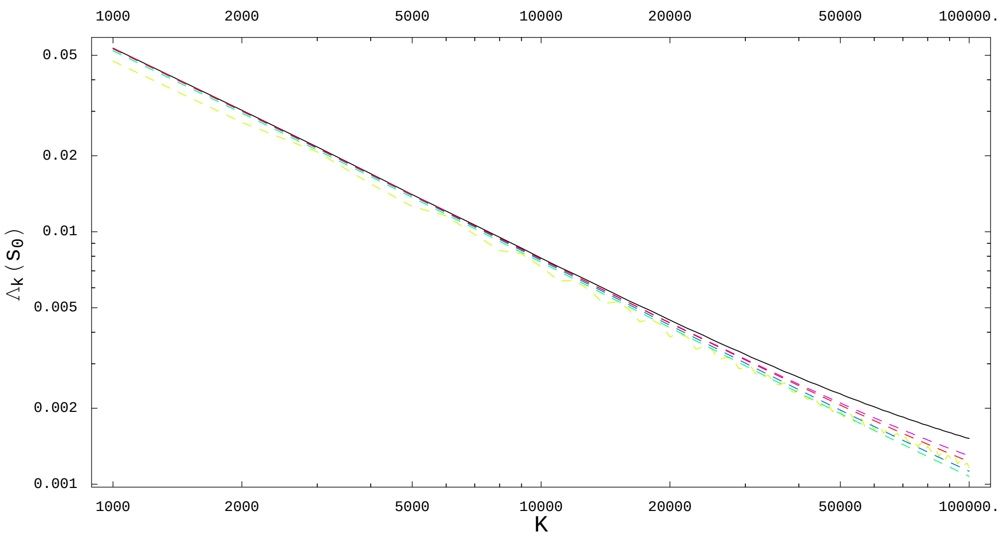
$$\dot{\vec{s}}_1 = \vec{s}_2 \times \vec{s}_1 = \vec{s}_3 \times \vec{s}_4 = \dot{\vec{s}}_4 \tag{132 a}$$
$$\dot{\vec{s}}_2 = \vec{s}_1 \times \vec{s}_2 = \vec{s}_4 \times \vec{s}_3 = \dot{\vec{s}}_3 \tag{132 b}$$

und das im allgemeinen nicht integrable System von Differentialgleichungen hat eine exakte Lösung. Diese Lösung entspricht der Zeitentwicklung von zwei ungekoppelten Spin-Dimeren mit denselben Anfangsbedingungen.

$$\vec{s}_\mu(t) = \mathbb{D}(\vec{S}/2, t)\, \vec{s}_\mu(0) \tag{133}$$

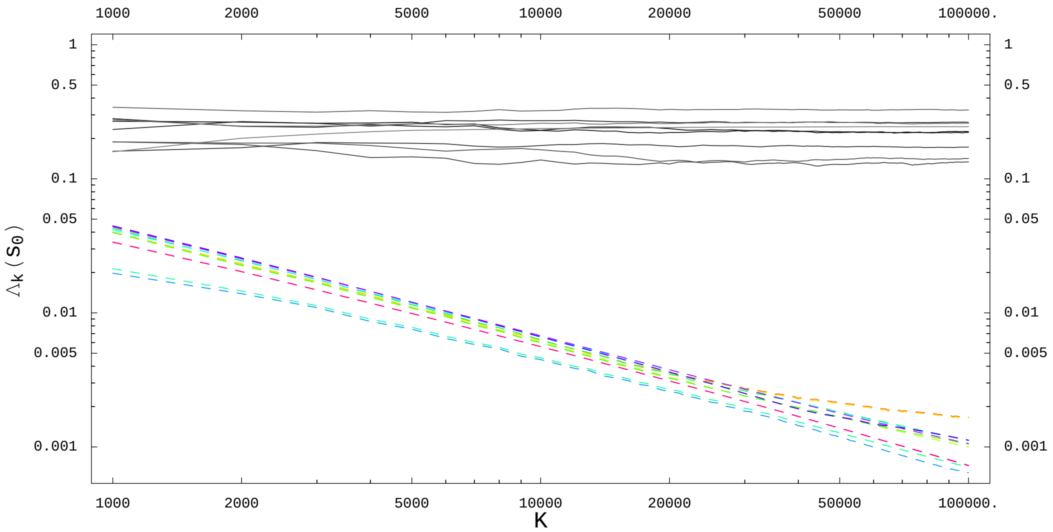


In der nachfolgenden Abbildung ist das Ergebnis einer weiteren numerischen Rechnung für die Heisenberg-Graphen mit $N = 4$ Spins dargestellt. Diesmal ist der Anfangspunkt s_0 symmetrisch gewählt.



Alle 6 Heisenberg-Graphen mit $N = 4$ Spins zeigen für den symmetrisch gewählten Anfangspunkt s_0 Ljapunov-Exponenten $\Lambda_K(s_0)$, die entlang einer Hyperbel zu Null zerfallen. Nun gilt auch für die 4er-Kette $\Lambda_K(s_0) \to 0$.
Das Beispiel der 4er-Kette macht die Abhängigkeit des Ljapunov-Exponenten

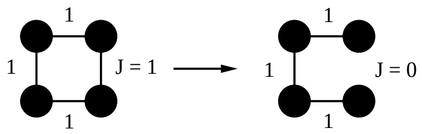
vom Punkt s_0 im Phasenraum deutlich. Aufgrund dieser Abhängigkeit und der Tatsache, dass in einem nicht integrablen System nicht nur chaotische sondern auch reguläre Phasenraum-Trajektorien möglich sind, können wir aus dem numerischen Ergebnis $\Lambda_K(s_0) \to 0$ nicht die Integrabilität eines Systems ableiten. Allerdings können wir aus dem Ergebnis $\Lambda_K(s_0) > 0$ mit hoher Wahrscheinlichkeit auf chaotisches Verhalten schließen und somit die Integrabilität eines Systems ausschließen.
Berücksichtigen wir zusätzlich die Ergebnisse zur Heisenberg-Integrabilität, so haben wir mit numerischer Sicherheit nachgewiesen, dass der einzige nicht Heisenberg-integrable Graph bis $N = 4$ Spins, die 4er-Kette, überhaupt nicht integrabel ist. Um den Zusammenhang zwischen der Integrabilität und der Heisenberg-Integrabilität von Systemen genauer zu untersuchen, wenden wir das numerische Verfahren auf die verbleibenden Graphen in Tabelle 1 an.
Die nachfolgende Abbildung zeigt das Ergebnis einer numerischen Rechnung für die Heisenberg-Graphen mit $N = 5$ Spins. Der Anfangspunkt s_0 ist wieder zufällig und für alle Graphen übereinstimmend gewählt. Die Ergebnisse für die nicht Heisenberg-integrablen Graphen sind über durchgezogene (graue) Linien und die Ergebnisse für die Heisenberg-integrablen Graphen sind über gestrichelte (farbige) Linien dargestellt.



Alle nicht Heisenberg-integrablen Graphen mit $N = 5$ Spins haben für den zufällig gewählten Anfangspunkt s_0 deutlich positive Ljapunov-Exponenten $\Lambda_K(s_0)$ und sind demzufolge höchst wahrscheinlich nicht integrabel. Dieses Ergebnis fassen wir in der folgenden Aussage zusammen.

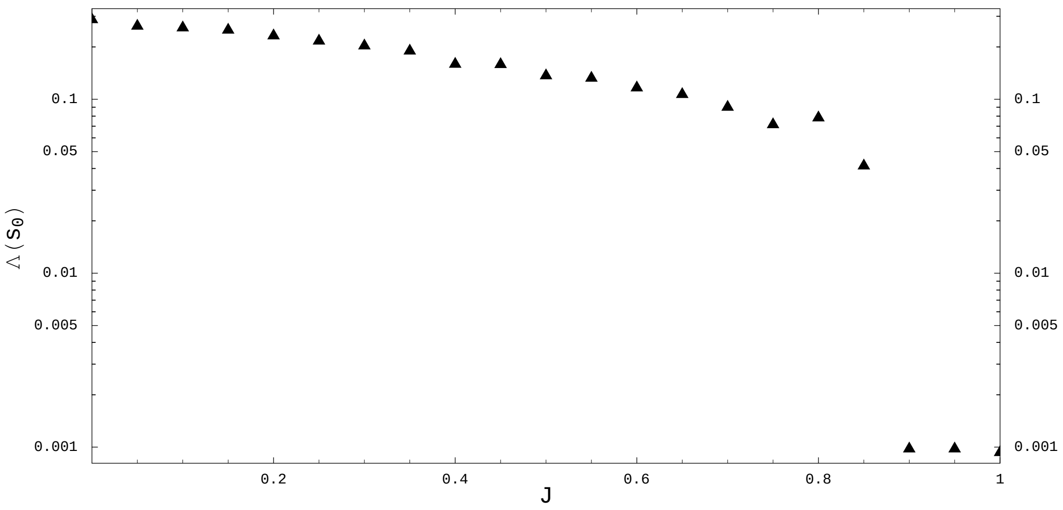
Numerisches Ergebnis *Für jeden Heisenberg-Graphen H mit $N \leq 5$ Spins gilt: H ist genau dann integrabel, wenn H Heisenberg-integrabel ist.*

Weitere Stichproben lassen vermuten, dass diese Aussage unabhängig von der Zahl N der Spins für alle Heisenberg-Graphen gilt. Allerdings ist der Beweis dieser Vermutung mit der folgenden Schwierigkeit verbunden: Zum einen können wir für nicht Heisenberg-integrable Graphen nicht ausschließen, dass es N beliebige Funktionen auf dem Phasenraum gibt, die unabhängige, vertauschbare Erhaltungsgrößen sind. Zum anderen ist es nicht möglich, das numerische Verfahren auf die unbegrenzte Zahl von Graphen anzuwenden, die nicht Heisenberg-integrabel sind. Jedoch können wir die Vermutung durch die Tatsache stützen, dass in jedem nicht Heisenberg-integrablen Graphen die 4er-Kette enthalten ist. Da es sich bei der 4er-Kette um ein nicht integrables, chaotisches System handelt, ist es aus physikalischer Sicht durchaus plausibel, dass durch die Kopplung mit weiteren Spins das chaotische Verhalten der 4er-Kette nicht unterbunden wird.
Mit Hilfe des Ljapunov-Exponenten können wir deutlich machen, dass die Aussagen über Graphen im allgemeinen Fall $J_{\mu\nu} \in \mathbb{R}$ nicht gültig sind. Dazu gehen wir von zwei bekannten Graphen aus: das (Heisenberg-) integrable Quadrat und die nicht (Heisenberg-) integrable 4er-Kette. Wir bezeichnen mit J eine beliebige Kopplungsstärke $J_{\mu\nu} \neq 0$, beispielsweise $J = J_{12}$. Für $J \to 0$ ($J_{23} = J_{34} = J_{41} = 1$) geht das Quadrat in die 4er-Kette über.



Das klassische Heisenberg-System $H = J\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3 + \vec{s}_3 \cdot \vec{s}_4 + \vec{s}_4 \cdot \vec{s}_1$ ist für $0 < J < 1$ kein Graph und enthält *keine* (allgemeine) 4er-Kette. Die nachfolgende Abbildung zeigt den Ljapunov-Exponenten $\Lambda(s_0)$ ($\Lambda_K(s_0)$ mit $K = 100.000$) in Abhängigkeit von der Kopplungsstärke J.
Für $0 \leq J < 0.9$ erhalten wir für den zufällig gewählten Anfangspunkt s_0 deutlich positive Ljapunov-Exponenten $\Lambda(s_0)$. Mit hoher Wahrscheinlichkeit zeigt H chaotisches Verhalten und ist nicht integrabel. Für $0.9 \leq J \leq 1$ erhalten wir dagegen Ljapunov-Exponenten $\Lambda(s_0)$ in der Nähe von Null. H zeigt demnach reguläres Verhalten und ist möglicherweise integrabel. Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung mit der KAM-Theorie, nach der eine Bewegung unter einer kleinen Störung $\epsilon\, H_1 = (1 - J)\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$ regulär bleiben *kann* [11, S.187 f]. Wir halten folgendes Ergebnis fest:

Numerisches Ergebnis *Ein klassisches Heisenberg-System H, das nicht integrabel ist, muss keine 4er-Kette enthalten.*



0.1
0.05
0.01
0.005
0.001
Λ(S0)
0.2
0.4
0.6
0.8
1
J

4 Symplektische Integratoren

Diejenigen klassischen Heisenberg-Systeme, die sich durch die gleichförmige Kopplung iterativ erzeugen lassen, verfügen über einen Konstruktionsbaum, mit dem sich die Zeitentwicklung explizit angeben lässt. Zu dieser Menge von Systemen gehören zwar die Heisenberg-integrablen Graphen, aber durchaus nicht alle Heisenberg-integrablen Systeme. Auch wenn die auf dem numerisch bestimmten Ljapunov-Exponenten gestützte Vermutung zutrifft, dass jedes integrable System auch Heisenberg-integrabel ist, gibt es demnach integrable Systeme, die keinen Konstruktionsbaum besitzen. Für diese Systeme müssen die Bewegungsgleichungen nach wie vor gelöst werden.

Für ein integrables System lassen sich zwar Winkel- und Wirkungsvariablen finden, so dass die Bewegungsgleichungen explizit lösbar sind, sofern sich die Integrationen ausführen lassen, die für die Definition dieser Variablen notwendig sind. Allerdings müssen die Winkel- und Wirkungsvariablen für ein gegebenes System zunächst gefunden werden. Bereits für kleine Systeme wie das allgemeine Spin-Dreieck ist diese Suche mit erheblichen Aufwand verbunden.

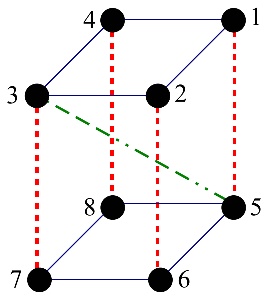
Dagegen lassen sich für nicht integrable Systeme die Bewegungsgleichungen nicht mehr explizit lösen. Wie das Beispiel der 4er-Kette deutlich macht, ist die Angabe der Zeitentwicklung nur für wenige Anfangsbedingungen möglich. Deswegen müssen die Bewegungsgleichungen in der Regel numerisch gelöst werden. Da in nicht integrablen Systemen chaotisches Verhalten möglich ist, können geringe Rechenungenauigkeiten im Laufe der numerischen Integration zu exponentiell großen Fehlern führen.

Für viele Fragestellungen spielt das Langzeitverhalten von Systemen eine wichtige Rolle. Deswegen ist der Integrationszeitraum meist viel größer als die Zeitschritte, die in den üblichen Standardverfahren verwendet werden können. Somit ist eine hohe Zahl von Integrationsschritten notwendig, die zu großen Abweichungen führt, sofern die verwendeten Zeitschritte nicht sehr klein sind. Jedoch ist die Verwendung kleiner Zeitschritte mit einer langen Rechenzeit verbunden.

In diesem Abschnitt stellen wir eine neue symplektische Methode zur Lösung der Bewegungsgleichungen von klassischen Heisenberg-Systemen vor. Diese Methode beruht auf der Zerlegung von Exponentialoperatoren und ist für die Verwendung von größeren Zeitschritten geeignet [6]. Da das Verfahren symplektisch ist, bleiben beispielsweise die Phasenraum-Volumen konstant. Zudem gewährleistet das Verfahren, dass der Gesamtspin und die Beträge der Einzelspins erhalten sind. Obwohl die Gesamtenergie nicht exakt erhalten ist, zeigt sich im Gegensatz zu den Standardverfahren keine systematische Drift, sondern nur eine beschränkte Fluktuation um die Anfangsenergie.

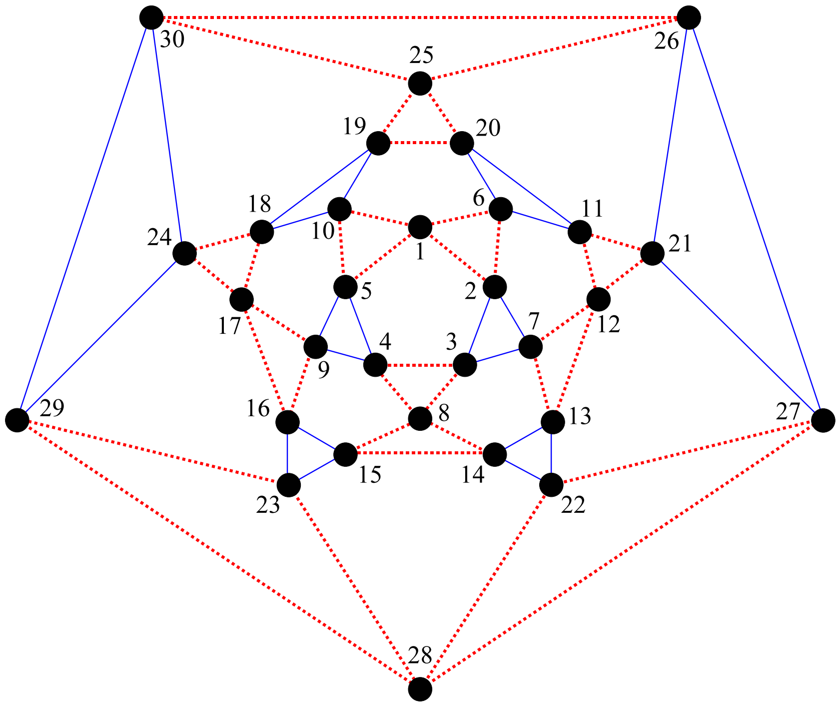
4.1 Zerlegung in integrable Systeme

Jedes klassische Heisenberg-System H mit N Spins lässt sich als Summe von N-Spin-Systemen $H_1, \ldots, H_K$ darstellen, für die sich die Zeitentwicklungen explizit angeben lassen. Dabei spielt es keine Rolle, ob H integrabel oder nicht integrabel ist.
Beispielsweise können wir H in Systeme der Form $J_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu$ zerlegen, die aus einem Spin-Dimer und $N-2$ ungekoppelten Einzelspins bestehen. Sind alle Kopplungsstärken $J_{\mu\nu} \neq 0$, so erhalten wir auf diese Art und Weise $K = \binom{N}{2}$ Summanden. Für jeden dieser Summanden können wir die Zeitentwicklung angeben.
Für viele Systeme lässt sich eine Zerlegung von H in nur zwei Summanden H_1 und H_2 finden. Zum Beispiel können wir einen zusammenhängenden und Heisenberg-integrablen Graphen H in zwei getrennte Heisenberg-integrable Teilgraphen H_A und H_B mit gleichförmiger Kopplung H_{AB} zerlegen und anschließend $H_1 = H_A + H_B$ und $H_2 = H_{AB}$ wählen. H_1 und H_2 sind Heisenberg-integrabel und verfügen somit über einen Konstruktionsbaum, mit dem wir die Zeitentwicklung explizit angeben können. Weil außerdem die Zeitentwicklung von H bekannt ist, eignet sich diese Zerlegung vor allem für den Test der neuen symplektischen Methode.
Auch für die nicht Heisenberg-integrablen Graphen bis $N = 5$ Spins können wir zwei geeignete Summanden finden. In Tabelle 2 sind für diese 10 Systeme mögliche Zerlegungen in Heisenberg-integrable Graphen angegeben. Dennoch gibt es nicht Heisenberg-integrable Graphen, die sich nicht als Summe von zwei, sondern nur als Summe von mindestens drei Graphen darstellen lassen, die Heisenberg-integrabel sind und deswegen keine 4er-Kette enthalten. Ein Beispiel hierfür ist der Würfel mit einer Raumdiagonalen.



Dagegen ist der Ikosidodekaeder ein weiteres Beispiel, das deutlich macht, dass es in vielen Fällen zwei geeignete Summanden gibt. Die nachfolgende Abbildung zeigt eine mögliche Zerlegung in ein ungekoppeltes System von 6

Fliegen (rote, gestrichelte Linien) und in ein weiteres ungekoppeltes System von 8 Dreiecken und 6 einzelnen Spins (blaue, durchgezogene Linien).



4.2 Zerlegung von Exponentialoperatoren

Zu jeder Funktion $f : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ gibt es ein Vektorfeld V^f auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$. Für ein System von N klassischen Spins ist dieses Vektorfeld ein N-Tupel mit den Elementen

$$V^f_\mu = \{\vec{s}_\mu, f\} = \frac{\partial f}{\partial \vec{s}_\mu} \times \vec{s}_\mu \quad (134\text{ a})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\partial f \,/\, \partial s^3_\mu & \partial f \,/\, \partial s^2_\mu \\ \partial f \,/\, \partial s^3_\mu & 0 & -\partial f \,/\, \partial s^1_\mu \\ -\partial f \,/\, \partial s^2_\mu & \partial f \,/\, \partial s^1_\mu & 0 \end{pmatrix} \vec{s}_\mu \quad (134\text{ b})$$

$$\equiv \mathbb{V}^f_\mu \, \vec{s}_\mu . \quad (134\text{ c})$$

Ist f die Hamilton-Funktion H des betrachteten Spin-Systems, so sind die

Bewegungsgleichungen für $s = (\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N)$ durch

$$\dot{s} = V^H = \mathbb{V}^H s \quad \text{mit} \quad \mathbb{V}^H = \begin{pmatrix} \mathbb{V}_1^H & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mathbb{V}_N^H \end{pmatrix} \tag{135}$$

gegeben. Diese Bewegungsgleichungen sind ein endlichdimensionales System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung. Die formale Lösung lautet

$$s(t) = \mathcal{F}_t^H \, s_0 \quad \text{mit} \quad s_0 = s(0). \tag{136}$$

Der Fluss $\mathcal{F}_t^H$ beschreibt die Zeitentwicklung für alle Phasenraum-Punkte s_0. Bekanntlich können wir für nicht integrable Systeme die Zeitentwicklung $\mathcal{F}_t^H \, s_0$ nicht explizit angeben. Sind A, $B : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$ zwei weitere Funktionen mit $H = A + B$, so gilt für die Vektorfelder $V^H = V^A + V^B$ und für die Flüsse gemäß [8, S.198 f]

$$\mathcal{F}_t^H \, s_0 = \lim_{K \to \infty} (\, \mathcal{F}_{t/K}^A \, \mathcal{F}_{t/K}^B \,)^K \, s_0. \tag{137}$$

Wenn A und B die Hamilton-Funktionen von zwei integrablen Spin-Systemen sind, für die wir die Zeitentwicklungen explizit angeben können, so sind wir in der Lage, die unbekannte Zeitentwicklung durch ein numerisches Verfahren zu berechnen. Im ersten Rechenschritt dieses Verfahrens wenden wir zuerst den Fluss $\mathcal{F}_\Delta^B$ auf den Anfangszustand s_0 und anschließend den Fluss $\mathcal{F}_\Delta^A$ auf den Zustand $\mathcal{F}_\Delta^B \, s_0$ an. Der Anfangszustand für den i-ten Rechenschritt des Verfahrens ist $s_i = \mathcal{F}_\Delta^A \, \mathcal{F}_\Delta^B \, s_{i-1}$. Die Schrittweite $\Delta = t/K$ bestimmt zum einen die Genauigkeit der numerischen Rechnung und legt zum anderen die Zahl K der Rechenschritte fest. Kleine Δ führen zu einer hohen Genauigkeit, aber auch zu großen K und demnach zu einer langen Rechenzeit. Für $\Delta \to 0$ wird die Näherung exakt. Wie wir sehen werden, ist dieses Verfahren zwar symplektisch, aber nicht geeignet für größere Zeitschritte.
Nun betrachten wir die Bewegungsgleichungen $\dot{s} = \mathbb{V}^H s$ erneut und stellen die formale Lösung in der Form

$$s(t + \Delta) = e^{\mathbb{M}^H \Delta} \, s(t) \tag{138}$$

dar [6], wobei $\mathbb{M}^H \neq \mathbb{V}^H$ für $\mathbb{V}^H \neq \text{const.}$ ist! [5] Da die zwei Funktionen A

[5] Im Anhang "Exponentialdarstellung des Flusses" ist eine ausführliche Begründung dafür, dass Gleichung (136) und (138) äquivalente Darstellungen der Lösung sind.

und B die Gleichung $H = A + B$ erfüllen, gilt $\mathbb{M}^H = \mathbb{M}^A + \mathbb{M}^B$. Wenn die Poisson-Klammer zwischen A und B nicht verschwindet, dann vertauschen $\mathbb{M}^A$ und $\mathbb{M}^B$ nicht miteinander und es gilt

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} \neq e^{\mathbb{M}^A \Delta}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta}. \tag{139}$$

Deswegen ersetzen wir die rechte Seite der Ungleichung durch ein Produkt und erhalten auf diese Art und Weise

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = \prod_{i=1}^{P} e^{a_i\, \mathbb{M}^A \Delta}\, e^{b_i\, \mathbb{M}^B \Delta} + \mathcal{O}(\Delta^{K+1}). \tag{140}$$

Entwickeln wir die Terme auf beiden Seiten der Gleichung in eine Reihe und fassen die Koeffizienten vor gleichen Potenzen von Δ zusammen, so liefert der Vergleich der Ausdrücke eine Gleichung für jede Ordnung von Δ, die zum einen $\mathbb{M}^A$, $\mathbb{M}^B$ und zum anderen die Parameter a_i, b_i enthält. Sortieren wir in gleicher Reihenfolge auftretende Kombinationen von $\mathbb{M}^A$ und $\mathbb{M}^B$, dann erhalten wir durch den Vergleich der Koeffizienten ein Gleichungssystem für a_i und b_i. Durch eine geeignete Wahl dieser Parameter können wir für ein gegebenes $P \geq 1$ das größte $K \geq 1$ erreichen.
Für $P = 1$ lässt sich eine Übereinstimmung in erster, aber nicht in zweiter Ordnung erreichen. Eine ausführliche Rechnung im Anhang zeigt, dass die Wahl von $a_1 = b_1 = 1$ zudem eindeutig ist.

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = e^{\mathbb{M}^A \Delta}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta} + \mathcal{O}(\Delta^2) \tag{141}$$

Dagegen können wir für $P = 2$ eine Übereinstimmung bis einschließlich der zweiten Ordnung finden. Allerdings ist der Lösungsraum für die Parameter eindimensional: $a_1 = 1 - 1/(2 - 2\,b_2)$, $a_2 = 1/(2 - 2\,b_2)$, $b_1 = 1 - b_2$. Zum Beispiel liefert $b_2 = 0$ die *Suzuki-Trotter-Zerlegung* zweiter Ordnung

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = e^{\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta}\, e^{\mathbb{M}^A \Delta/2} + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{142}$$

Für größere P lassen sich genauere Näherungen finden. Beispielsweise ist die Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = \prod_{i=1}^{5} e^{p_i\, \mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{p_i\, \mathbb{M}^B \Delta}\, e^{p_i\, \mathbb{M}^A \Delta/2} + \mathcal{O}(\Delta^5) \tag{143}$$

mit $p_1 = p_2 = p_4 = p_5 \equiv p = 1/(4 - 4^{1/3})$ und $p_3 = 1 - 4\,p$ ein Produkt von 15

Exponentialoperatoren. Jedoch lassen sich aufeinanderfolgende Faktoren mit $\mathbb{M}^A$ zusammenfassen, so dass diese Zerlegung aus insgesamt 11 Operatoren besteht. Andere Zerlegungen vierter Ordnung kommen mit weniger Faktoren aus. Zum Beispiel ist die *Forest-Ruth-Zerlegung* ein Produkt von lediglich 7 Faktoren der Form $a_1 = a_4 = \theta/2$, $a_2 = a_3 = (1-\theta)/2$, $b_1 = b_3 = \theta$ und $b_2 = 1 - 2\,\theta$ [6]. Dabei ist $\theta = 1/(2 - 2^{1/3})$. Obwohl diese Näherung mit nur 7 Operatoren auskommt und somit weniger Rechenzeit für einen einzelnen Integrationsschritt benötigt, wird sich zeigen, dass die Fehler deutlich größer als bei der Suzuki-Trotter-Zerlegung sind. Weitaus geringere Abweichungen zeigt eine optimierte Variante der Forest-Ruth-Zerlegung. Diese Näherung ist ebenfalls vierter Ordnung und besteht aus 9 Faktoren mit $a_1 = a_5 = \xi$, $a_2 = a_4 = \chi$, $a_3 = 1 - 2\,(\xi + \chi)$, $b_1 = b_4 = (1 - 2\,\lambda)/2$ und $b_2 = b_3 = \lambda$. Da ξ, χ und λ nicht eindeutig bestimmt sind, können diese Parameter variiert werden, um den Fehler empirisch zu minimieren. Eine geringe Abweichung ergibt sich für $\xi = 0.17208656$, $\chi = -0.16162176$ und $\lambda = -0.09156203$ [6]. Dagegen erhalten wir für $\xi = 0$, $\chi = \theta$ und $\lambda = (1-\theta)/2$ die bekannte Forest-Ruth-Zerlegung.

Die Zerlegung von Exponentialoperatoren können wir auch für klassische Spin-Systeme durchführen, die sich nicht als Summe von zwei, sondern nur als Summe von mindestens drei integrablen Systemen darstellen lassen, für die wir die Zeitentwicklung explizit angeben können. Zum Beispiel eignet sich für $H = A + B + C$ ein Ansatz der Form

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = \prod_{i=1}^{P} e^{a_i\, \mathbb{M}^A \Delta}\, e^{b_i\, \mathbb{M}^B \Delta}\, e^{c_i\, \mathbb{M}^C \Delta} + \mathcal{O}(\Delta^{K+1}). \tag{144}$$

Für $P = 1$ erhalten wir eine Übereinstimmung in erster Ordnung und die Parameter $a_1 = b_1 = c_1 = 1$ sind eindeutig bestimmt.

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = e^{\mathbb{M}^A \Delta}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta}\, e^{\mathbb{M}^C \Delta} + \mathcal{O}(\Delta^2) \tag{145}$$

Dagegen lässt sich eine Übereinstimmung in zweiter Ordnung erst für $P = 3$ erreichen. Eine mögliche Wahl der Parameter liefert die Näherung

$$e^{\mathbb{M}^H \Delta} = e^{\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^C \Delta}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^A \Delta/2} + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{146}$$

Um Zerlegungen höherer Ordnung zu finden, können wir einen Algorithmus verwenden, der für ein gegebenes P die Gleichungen für a_i, b_i und c_i bestimmt und diese Parameter geeignet wählt, um das größte K zu erreichen. Allerdings erhalten wir für große K ein komplexes Gleichungssystem für a_i, b_i und c_i, das sich algorithmisch nicht mehr lösen lässt, sofern wir die Zahl der freien Parameter nicht reduzieren.

4.3 Eigenschaften des Verfahrens

Der Fluss $\mathcal{F}_t^H$ eines Hamiltonschen Vektorfeldes V^H ist für alle feste Zeiten t eine symplektische Transformation auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$ [7, S.172 f]. Diese Aussage ist nicht mit dem Liouvilleschen Satz zu verwechseln, nach dem für ein konservatives System H die Phasenraum-Volumen unter dem Fluss $\mathcal{F}_t^H$ konstant bleiben. Zwar ist jede symplektische Abbildung volumentreu, aber im allgemeinen ist eine volumentreue Abbildung nicht symplektisch.
Die Integrationsschritte des vorgestellten numerischen Verfahrens bestehen aus einer Zahl elementarer Rechenoperationen. Diese Rechenoperationen sind exakte Zeitentwicklungen von klassischen Spin-Systemen, beispielsweise von zwei Systemen A und B. Weil die Flüsse $\mathcal{F}_t^A$ und $\mathcal{F}_t^B$ der Hamiltonschen Vektorfelder V^A und V^B die Zeitentwicklung der beiden Systeme A und B beschreiben und symplektische Transformationen auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$ sind, ist jede einzelne Rechenoperation und somit das gesamte numerische Verfahren symplektisch.
Außerdem bleiben während der numerischen Integration diejenigen Größen konstant, die sowohl im System A als auch im System B erhalten sind. Zu diesen Größen gehören die Volumen im Phasenraum $\mathcal{P}$ und die Beträge der Einzelspins $\vec{s}_\mu$. Sind A und B rotationsinvariant, so bleiben auch die drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ konstant. Jedoch ist die Gesamtenergie H in der Regel nicht erhalten. Wie wir sehen werden, zeigt sich allerdings keine systematische Drift und der Fehler ist beschränkt.
In einigen der vorgestellten Zerlegungen von Exponentialoperatoren treten die Operatoren $e^{a_i \mathbb{M}^A \Delta}$ und $e^{b_i \mathbb{M}^B \Delta}$ symmetrisch auf. Für diese Zerlegungen sind die Integrationsschritte zeitlich umkehrbar. Zum Beispiel können wir für die Suzuki-Trotter-Zerlegung zweiter Ordnung den Operator

$$\mathbb{U}(\Delta) \equiv e^{\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta}\, e^{\mathbb{M}^A \Delta/2} \tag{147}$$

definieren und erhalten

$$\mathbb{U}(\Delta)\, \mathbb{U}(-\Delta) = e^{\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{\mathbb{M}^B \Delta}\, e^{\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{-\mathbb{M}^A \Delta/2}\, e^{-\mathbb{M}^B \Delta}\, e^{-\mathbb{M}^A \Delta/2} = \mathbb{I} \tag{148}$$

und $\mathbb{U}(-\Delta)\, \mathbb{U}(\Delta) = \mathbb{I}$. Entsprechendes gilt für die Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung, die Forest-Ruth-Zerlegung und die optimierte Variante der Forest-Ruth-Zerlegung.

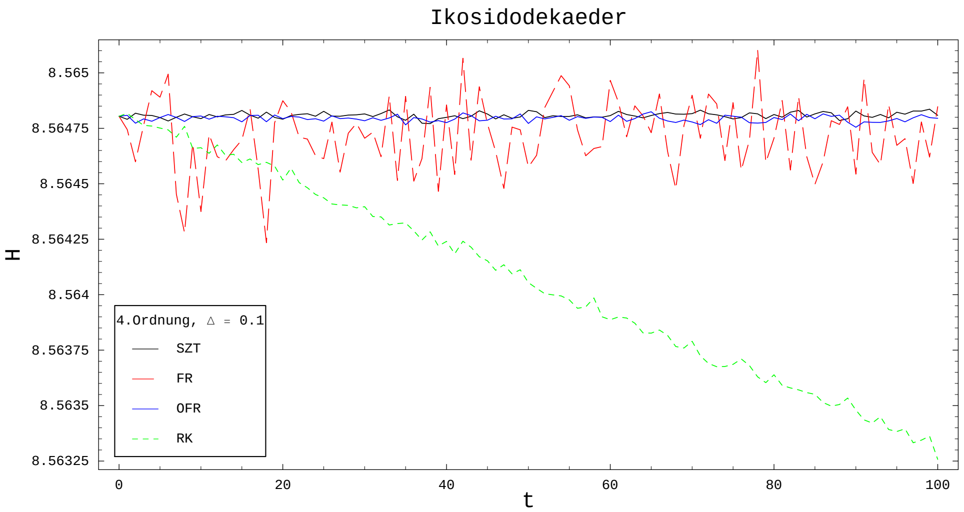
4.4 Ergebnisse

4.4.1 Gesamtenergie

Die nachfolgende Abbildung zeigt das Ergebnis einer numerischen Rechnung für den Ikosidodekaeder. In dieser Rechnung wird das Zerlegungsverfahren erster Ordnung mit einer Schrittweite $\Delta = 0.1$ verwendet und eine zufällige Anfangsbedingung s_0 gewählt. Die Zerlegung des Ikosidodekaeders erfolgt in ein ungekoppeltes System von 6 Fliegen und in ein weiteres ungekoppeltes System von 8 Dreiecken und 6 einzelnen Spins. In der Abbildung sind die drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ und die Gesamtenergie H in Abhängigkeit von der Integrationszeit t aufgetragen.

Wie in der Abbildung zu erkennen ist, gewährleistet das Verfahren, dass die drei Komponenten des Gesamtspins $\vec{S}$ während der numerischen Integration in Maschinengenauigkeit erhalten bleiben. Dagegen ist die Gesamtenergie H nicht konstant. Allerdings schwankt H um den tatsächlichen Wert und zeigt keine systematische Drift in irgendeine Richtung. Außerdem ist der Betrag des Fehlers beschränkt und überschreitet im Integrationszeitraum von $t = 0$ bis 100 nicht den Wert von 0.6.
Zum Vergleich ist in der nächsten Abbildung das Ergebnis einer weiteren numerischen Rechnung für den Ikosidodekaeder gezeigt. In dieser Rechnung werden für dieselbe Schrittweite $\Delta = 0.1$ und dieselbe Anfangsbedingung s_0 verschiedene Verfahren vierter Ordnung verwendet: die Zerlegungsverfahren Suzuki-Trotter (SZT), Forest-Ruth (FR), optimierter Forest-Ruth (OFR) und das Standardverfahren Runge-Kutta (RK). Für die Methoden SZT, FR

und OFR wird die bekannte Zerlegung des Ikosidodekaeders in ein System von Fliegen und in ein System von Dreiecken vorgenommen.

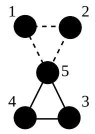


Wie aus der Abbildung deutlich hervorgeht, führt das RK-Verfahren zu einer systematischen Drift der Gesamtenergie H und liefert schon für kleine Zeiten t einen größeren Fehler als die Methoden SZT, FR und OFR. Zum Zeitpunkt $t = 100$ hat der Fehler einen Betrag von etwa $1.5 \cdot 10^{-3}$. Obwohl dieser Wert kleiner als bei der zuvor verwendeten Zerlegung erster Ordnung ist, liefern die Zerlegungsverfahren vierter Ordnung geringere Abweichungen, die zudem keiner systematischen Drift unterliegen. Während der Fehler von FR einen Wert von $0.5 \cdot 10^{-3}$ nicht überschreitet, sind die Abweichungen von OFR und SZT noch geringer und liegen bei ungefähr $0.05 \cdot 10^{-3}$. Diese Abweichung ist um einen Faktor 30 kleiner als beim RK-Verfahren.

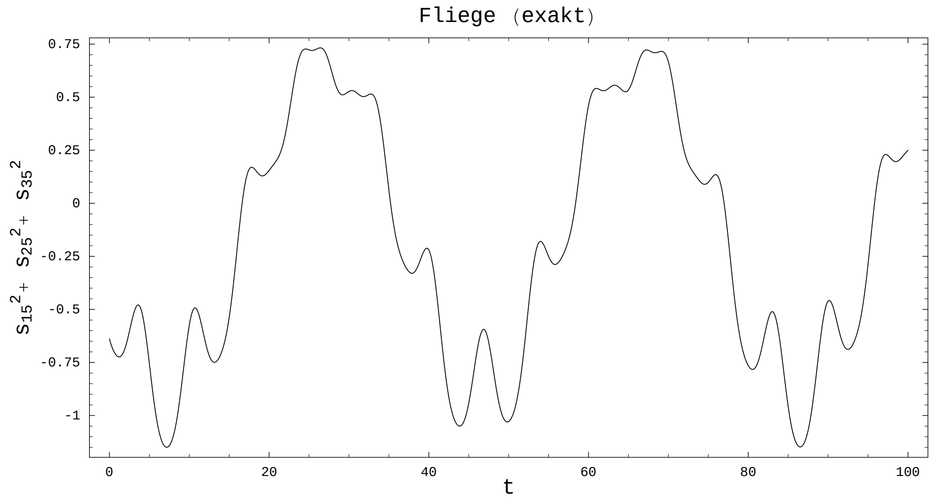
4.4.2 Vergleich mit exakten Lösungen

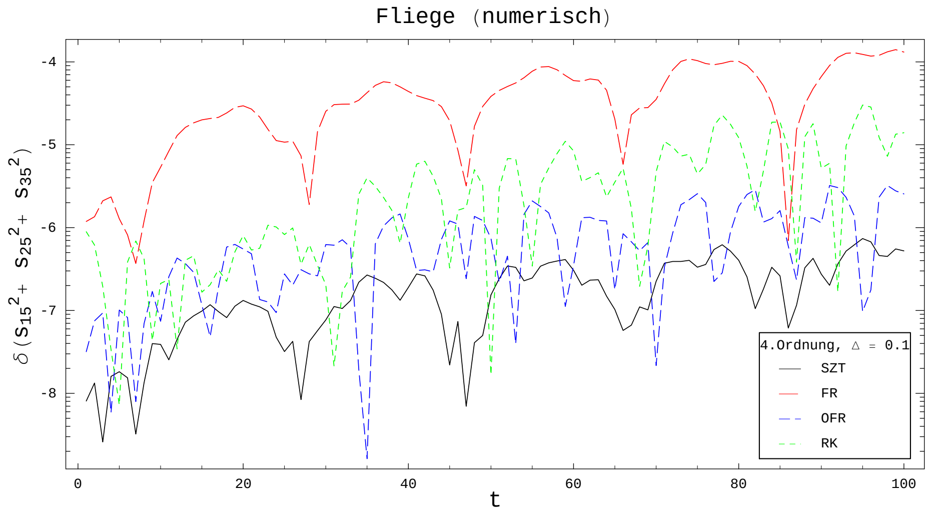
Das Ergebnis der durchgeführten Rechnung hat mit hoher Sicherheit gezeigt, dass die Zerlegungsverfahren SZT, FR und OFR für dieselbe Schrittweite Δ eine Genauigkeit der Gesamtenergie H liefern, die bereits für kleine Zeiten t um eine Größenordnung kleiner ist als beim RK-Verfahren. Jedoch bleibt zu überprüfen, ob diese Zerlegungsverfahren genaue Ergebnisse für zeitlich veränderliche Größen liefern. Für diese Überprüfung bietet sich der Vergleich mit exakten Lösungen von integrablen Spin-Systemen an.

Da die numerischen Untersuchungen zum Ljapunov-Exponenten mit hoher Wahrscheinlichkeit bestätigt haben, dass es sich beim Ikosidodekaeder um ein nicht integrables Spin-System handelt, führen wir die folgenden Rechnungen für eine kleine Auswahl der Heisenberg-integrablen Graphen in Tabelle 1 durch.



Die nachfolgenden zwei Abbildungen zeigen das Ergebnis einer numerischen Rechnung für die Fliege. Die erste Grafik stellt den exakten zeitlichen Verlauf der Funktion $s_{15}^2 + s_{25}^2 + s_{35}^2$ für eine zufällig gewählte Anfangsbedingung s_0 dar. s_{ij}^2 ist eine Abkürzung für das Skalarprodukt $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$. Die zweite Grafik zeigt für dieselbe Anfangsbedingung s_0 die absolute Abweichung $\delta(s_{15}^2 + s_{25}^2 + s_{35}^2)$ der numerischen Verfahren SZT, FR, OFR und RK. Die Schrittweite $\Delta = 0.1$ ist übereinstimmend gewählt. Für die Methoden SZT, FR und OFR erfolgt die Zerlegung der Fliege in zwei Systeme, die beide aus einem Dreieck und zwei einzelnen Spins bestehen, den *Flügeln* der Fliege.

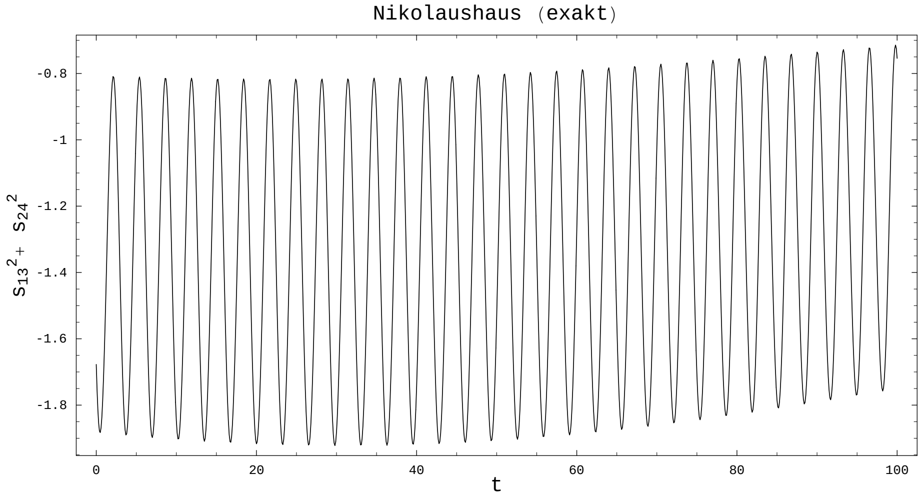


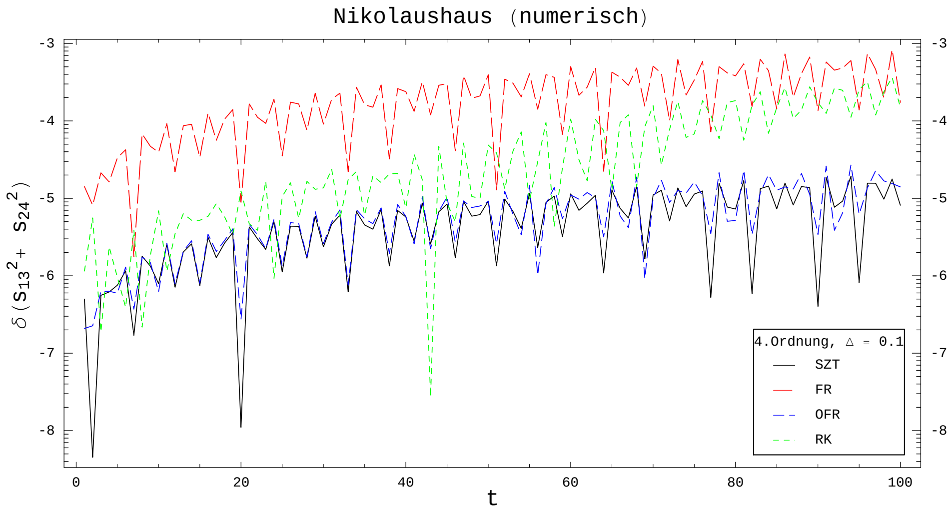


Wie in der Abbildung zu erkennen ist, liefert die FR-Methode die größte Abweichung von der exakten Lösung. Diese Abweichung liegt zum Zeitpunkt

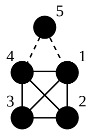
$t = 100$ bei ungefähr $2 \cdot 10^{-4}$ und ist somit um einen Faktor 7 größer als beim RK-Verfahren. Dagegen ist der Fehler der OFR-Methode deutlich geringer und mit einem Wert von etwa $3 \cdot 10^{-6}$ fast zwei Größenordnungen kleiner als der Fehler der nicht optimierten FR-Methode und eine Größenordnung kleiner als der Fehler des RK-Verfahrens. Die SZT-Zerlegung ist nochmals einen Faktor 5 genauer und liefert mit einer Abweichung von nur $6 \cdot 10^{-7}$ das beste Ergebnis.

Durch weitere Vergleiche mit exakten Lösungen von Heisenberg-integrablen Graphen erhalten wir ähnliche Ergebnisse. Zum Beispiel zeigen die nächsten zwei Abbildungen das Ergebnis einer numerischen Rechnung für das *Haus vom Nikolaus*.





Während die erste Grafik den exakten zeitlichen Verlauf der Funktion $s_{13}^2+s_{24}^2$ für eine zufällig gewählte Anfangsbedingung s_0 darstellt, zeigt die zweite

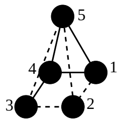


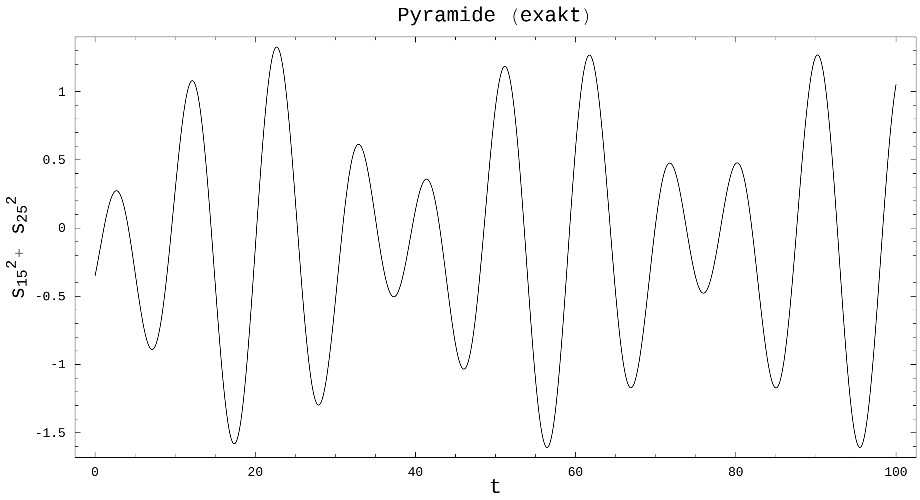
Grafik für dieselbe Anfangsbedingung s_0 die absolute Abweichung $\delta(s_{13}^2+s_{24}^2)$ der numerischen Verfahren SZT, FR, OFR und RK. Die Schrittweite $\Delta = 0.1$ ist übereinstimmend gewählt. Für die Methoden SZT, FR und OFR erfolgt die Zerlegung des Nikolaushauses in das *Dach* und das *Fachwerk*.
Wie aus der Abbildung hervorgeht, liefert auch diesmal die FR-Methode die größte Abweichung von der exakten Lösung. Zum Zeitpunkt $t = 100$ ist diese Abweichung mit einem Wert von etwa $8 \cdot 10^{-4}$ um einen Faktor 2 größer als beim RK-Verfahren. Dagegen führen die Zerlegungsverfahren OFR und SZT zu einem Fehler von nur $3 \cdot 10^{-5}$ und sind somit mehr als eine Größenordnung genauer als das RK-Verfahren.

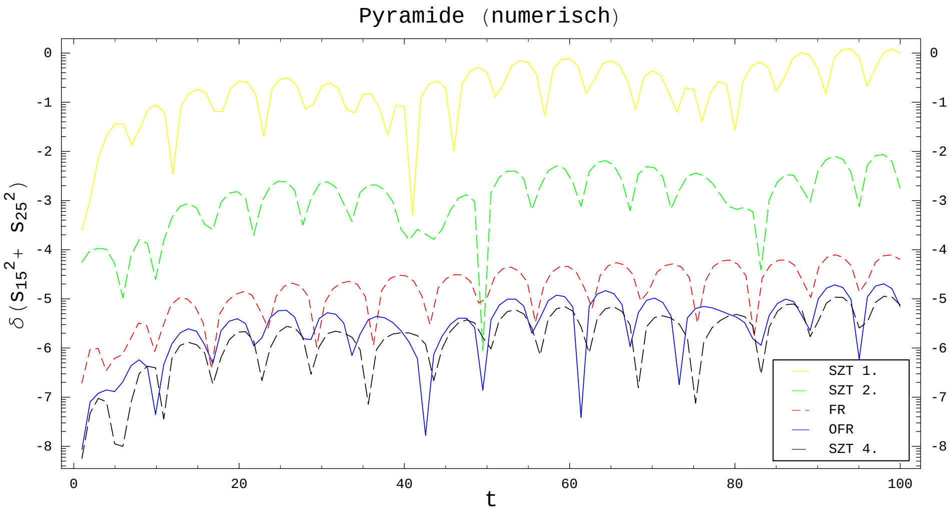
4.4.3 Laufzeiten

Die durchgeführten Rechnungen haben gezeigt, dass die Zerlegungsverfahren SZT und OFR bei gegebener Schrittweite Δ deutlich geringere Fehler liefern als das Standardverfahren RK. Obwohl die nicht optimierte FR-Methode zu größeren Abweichungen als das RK-Verfahren führt, sind die Ergebnisse von SZT und OFR um mehr als eine Größenordnung genauer.
Für die Anwendung ist vor allem die Laufzeit eines Integrationsverfahrens entscheidend. Während die verwendeten Zerlegungsverfahren mit Hilfe von *Mathematica* implementiert wurden, stammt das eingesetzte RK-Verfahren aus der von Mathematica bereitgestellten Bibliothek. Aus diesem Grund ist ein Vergleich der Laufzeiten nicht möglich, solange die Integrationsverfahren nicht in derselben Programmiersprache vorliegen. Allerdings überschreitet die Implementation in einer Programmiersprache wie *C* den Rahmen dieser Arbeit bei weitem.
Jedoch lassen sich die Laufzeiten der veschiedenen Zerlegungsverfahren auf einfache Art und Weise miteinander vergleichen. Zum Beispiel bestehen die Integrationsschritte der Suzuki-Trotter-Zerlegung zweiter Ordnung (*SZT2*) aus 3 elementaren Rechenoperationen, den exakten Zeitentwicklungen von zwei integrablen Systemen. Dagegen benötigt die Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung (*SZT4*) insgesamt 11 elementare Rechenoperationen für einen Integrationsschritt. Deswegen ist bei SZT4 die Rechenzeit für einen Integrationsschritt um einen Faktor $11/3 \approx 3.7$ größer als bei SZT2. Somit hat SZT4 bei übereinstimmender Schrittweite Δ die 3.7-fache Laufzeit von SZT2. Umgekehrt hat SZT4 bei übereinstimmender Laufzeit die 3.7-fache Schrittweite Δ von SZT2.
Die nachfolgenden zwei Abbildungen zeigen das Ergebnis einer numerischen Rechnung für die *Pyramide*. In dieser Rechnung ist die Laufzeit vorgegeben (insgesamt 10.000 elementare Rechenoperationen). Während in der ersten Grafik der exakte zeitliche Verlauf der Funktion $s_{15}^2 + s_{25}^2$ für eine zufällig

gewählte Anfangsbedingung s_0 dargestellt wird, ist in der zweiten Grafik für dieselbe Anfangsbedingung s_0 die absolute Abweichung $\delta(s_{15}^2+s_{25}^2)$ von SZT1, SZT2, SZT4, FR und OFR gezeigt. Für diese Verfahren erfolgt die Zerlegung der Pyramide in zwei *Triangeln*. Um für das jeweilige Verfahren die höchste Genauigkeit zu erhalten, ist die Schrittweite Δ so klein wie möglich gewählt, ohne die vorgegebene Laufzeit zu überschreiten.





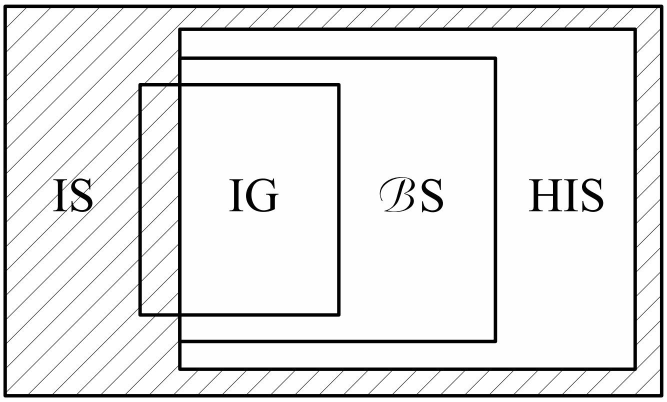


Nach dem Ergebnis der Rechnung führt SZT4 in dem Integrationszeitraum von $t = 0$ bis 100 zu einem maximalen Fehler von etwa $1 \cdot 10^{-5}$ und ist drei Größenordnungen genauer als SZT2 und sogar fünf Größenordnungen genauer als SZT1. Somit liefert SZT4 nicht nur bei gleicher Schrittweite Δ, sondern auch in der gleichen Laufzeit deutlich geringere Abweichungen als SZT2 und SZT1. Auch die anderen Zerlegungsverfahren vierter Ordnung

führen zu größeren Abweichungen als SZT4. So ist der maximale Fehler der OFR-Methode mit einem Wert von ungefähr $2 \cdot 10^{-5}$ doppelt so groß und der maximale Fehler der nicht optimierten FR-Methode mit einem Wert von etwa $1 \cdot 10^{-4}$ 10-mal so groß wie bei SZT4.
Die durchgeführte Rechnung hat gezeigt, dass die Zerlegungsverfahren vierter Ordnung die höhere Rechenzeit für einen einzelnen Integrationsschritt durch größere Schrittweiten Δ kompensieren können und dennoch deutlich kleinere Fehler liefern als die Zerlegungsverfahren erster und zweiter Ordnung. Dies führt zu der Vermutung, dass eine Zerlegung höherer Ordnung wie SZT8 in vorgegebener Laufzeit zu noch geringen Abweichungen führt. Wenn sich diese Vermutung bestätigt, dann ist diese Zerlegung ein effizientes Verfahren, das in Konkurrenz mit den üblichen Standard-Methoden treten kann.

5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit ist eine vollständige Charakterisierung der Klasse $\mathcal{HIG}$ der Heisenberg-integrablen Spin-Graphen gelungen. Diese Spin-Graphen sind durch die Eigenschaft gekennzeichnet, dass die 4er-Kette kein Teilsystem ist, und lassen sich in zwei Heisenberg-integrable Teilsysteme zerlegen, die entweder gleichförmig gekoppelt oder nicht gekoppelt sind. Dadurch ist die Existenz eines Konstruktionsbaumes $\mathcal{B}$ gewährleistet, mit dem die explizite Angabe der Zeitentwicklung als ein Produkt von Drehungen um feste Achsen möglich ist.
Die numerischen Untersuchungen zum Ljapunov-Exponenten haben zu der begründeten Vermutung geführt, dass die Klasse $\mathcal{HIG}$ mit der Klasse $\mathcal{IG}$ aller integrablen Spin-Graphen übereinstimmt. Allerdings ist die Eigenschaft, dass die 4er-Kette kein Teilsystem ist, nur für wenige Spin-Graphen erfüllt und bedeutet, dass vier miteinander gekoppelte Spins eines Spin-Graphen keine Kette bilden dürfen, sondern stattdessen Figuren wie beispielsweise einen Stern oder ein Quadrat formen müssen. Diese Eigenschaft trifft zum einen für die Mehrheit der kleinen Systeme zu und gilt zum anderen für diejenigen Systeme, die nicht weit von einem Pantaeder abweichen, in dem alle Spins gleichförmig miteinander koppeln. Spin-Gitter dagegen erfüllen diese Eigenschaft nicht. Deswegen eignen sich für eine direkte Anwendung der "$\mathcal{HIG}$-Theorie" vor allem kleine Cluster und magnetische Moleküle.



Für die allgemeinere Klasse $\mathcal{HIS}$ der Heisenberg-integrablen Systeme ist in dieser Arbeit keine vollständige Charakterisierung gelungen. Zum einen haben die numerischen Untersuchungen zum Ljapunov-Exponenten deutlich gemacht, dass es auch nicht Heisenberg-integrable Systeme gibt, die keine allgemeine 4er-Kette als Teilsystem haben. Zum anderen ist das allgemeine

Spin-Dreieck ein Beispiel für ein Heisenberg-integrables System, das nicht zu der Klasse $\mathcal{BS}$ derjenigen Systeme gehört, die über einen Konstruktionsbaum $\mathcal{B}$ verfügen. Für Heisenberg-integrable Systeme ohne Konstruktionsbaum $\mathcal{B}$ müssen die Bewegungsgleichungen nach wie vor gelöst werden. Bereits für ein sehr kleines System wie das allgemeine Spin-Dreieck ist die Lösung der Bewegungsgleichungen mit erheblichen Aufwand verbunden [9].
Deswegen findet das vorgestellte numerische Verfahren sowohl Anwendung für nicht integrable Systeme als auch Anwendung für integrable Systeme, die eine Hamilton-Funktion H vom Heisenberg-Typ haben. Das Verfahren nutzt aus, dass H aus Anteilen besteht, die Heisenberg-integrable Systeme aus der Klasse $\mathcal{BS}$ beschreiben, und verwendet die exakten Zeitentwicklungen dieser Systeme für eine Approximation der unbekannten Zeitentwicklung. Die Approximation beruht auf der Zerlegung von Exponentialoperatoren, die in verschiedenen Varianten und Ordnungen möglich ist.
Die grundlegenden Eigenschaften des Verfahrens sind unabhängig von der Wahl der Exponentialzerlegung: Es ist symplektisch und gewährleistet die Konstanz von typischen Erhaltungsgrößen wie den Phasenraum-Volumina, den Beträgen der Einzelspins und den drei Komponenten des Gesamtspins. Obwohl die Gesamtenergie in der Regel nicht exakt erhalten ist, zeigt sich in den durchgeführten Rechnungen keine systematische Drift, sondern nur eine beschränkte Fluktuation um die Anfangsenergie.
Dagegen bestimmt die Wahl der Exponentialzerlegung die Genauigkeit und die Rechenzeit des Verfahrens: Die Zerlegungen höherer Ordnung führen zu einer größeren Genauigkeit, sind aber – bei gleicher Schrittweite – mit einer höheren Rechenzeit verbunden. Allerdings hat sich in den durchgeführten Rechnungen herausgestellt, dass sich der Mehraufwand für einen einzelnen Integrationsschritt durch größere Zeitschritte kompensieren lässt, die nur zu einer kleinen Verringerung der Genauigkeit führen. So liefert beispielsweise die Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung Ergebnisse, die – bei gleicher Rechenzeit – um drei Größenordnungen genauer sind als die Ergebnisse der Suzuki-Trotter-Zerlegung zweiter Ordnung.
Obwohl noch kein Laufzeitvergleich mit den üblichen Standardmethoden durchgeführt worden ist, deuten die Ergebnisse dieser Arbeit darauf hin, dass der vorgestellte symplektische Integrator ein effektives und effizientes Konkurrenzverfahren darstellt.

A Anhang

A.1 Poisson-Klammer zwischen Skalarprodukten

Der Vektor $\vec{s}$ sei ein klassischer Spin. Somit gilt für die Komponenten von $\vec{s}$ (Einsteinsche Summenkonvention)

$$\{s_\mu^i, s_\nu^j\} = \delta_{\mu\,\nu}\,\epsilon_{i\,j\,k}\,s_\mu^k. \tag{149}$$

Wir betrachten nun die Poisson-Klammer zwischen zwei Skalarprodukten.

$$\begin{aligned}
& \{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda \cdot \vec{s}_\kappa\} && (150)\\
= \;& \{\sum_{i=1}^{3} s_\mu^i\, s_\nu^i, \sum_{j=1}^{3} s_\lambda^j\, s_\kappa^j\} && (151)\\
= \;& \sum_{i,j=1}^{3} \{s_\mu^i\, s_\nu^i, s_\lambda^j\, s_\kappa^j\} && (152)\\
= \;& \sum_{i,j=1}^{3} s_\mu^i\{s_\nu^i, s_\lambda^j\, s_\kappa^j\} + s_\nu^i\{s_\mu^i, s_\lambda^j\, s_\kappa^j\} && (153)\\
= \;& \sum_{i,j=1}^{3} s_\mu^i(s_\lambda^j\{s_\nu^i, s_\kappa^j\} + s_\kappa^j\{s_\nu^i, s_\lambda^j\}) + s_\nu^i(s_\lambda^j\{s_\mu^i, s_\kappa^j\} + s_\kappa^j\{s_\mu^i, s_\lambda^j\}) && (154)
\end{aligned}$$

Die Poisson-Klammer zwischen den Skalarprodukten verschwindet,

- wenn die Indizes μ, ν oder λ, κ gleich sind,
- wenn die Indexpaare μ, ν und λ, κ übereinstimmen oder
- wenn alle Indizes μ, ν, λ und κ verschieden sind.

Wir können uns deswegen auf verschiedene μ, ν, λ und $\kappa = \nu$ beschränken.

$$\begin{aligned}
& \{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda \cdot \vec{s}_\nu\} && (155)\\
= \;& \sum_{i,j=1}^{3} s_\mu^i\, s_\lambda^j\{s_\nu^i, s_\nu^j\} = \sum_{i,j,k=1}^{3} \epsilon_{i\,j\,k}\, s_\mu^i\, s_\lambda^j\, s_\nu^k && (156)\\
= \;& \vec{s}_\mu \cdot (\vec{s}_\lambda \times \vec{s}_\nu) = det(\vec{s}_\mu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\nu) && (157)
\end{aligned}$$

Ersetzen wir $\vec{s}_\lambda$ durch einen konstanten Vektor $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$, so erhalten wir über dieselbe Rechnung

$$\{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{k} \cdot \vec{s}_\nu\} = det(\vec{s}_\mu, \vec{k}, \vec{s}_\nu). \tag{158}$$

Ersetzen wir $\vec{s}_\mu$ und $\vec{s}_\lambda$ durch konstante Vektoren $\vec{k}_1, \vec{k}_2 \in \mathbb{R}^3$, dann ergibt sich über dieselbe Rechnung

$$\{\vec{k}_1 \cdot \vec{s}_\nu, \vec{k}_2 \cdot \vec{s}_\nu\} = det(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{s}_\nu). \tag{159}$$

Außerdem finden wir die Beziehung

$$\{\vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\lambda + \vec{s}_\nu \cdot \vec{s}_\lambda\} = det(\vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\mu) + det(\vec{s}_\mu, \vec{s}_\lambda, \vec{s}_\nu) = 0. \tag{160}$$

A.2 Vektor-Gleichungen

Lemma A.1 *$\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N$ seien klassische Spinvektoren. Wenn eine Gleichung*

$$\sum_{\mu=1}^{N} \vec{C}_\mu \cdot \vec{s}_\mu = c, \tag{161 a}$$

$$\sum_{\mu<\nu}^{N} C_{\mu\nu}\, \vec{s}_\mu \cdot \vec{s}_\nu = c, \tag{161 b}$$

$$\sum_{\mu<\nu}^{N} \vec{C}_{\mu\nu} \cdot (\vec{s}_\mu \times \vec{s}_\nu) = c, \tag{161 c}$$

$$\sum_{\mu<\nu<\lambda}^{N} C_{\mu\nu\lambda}\, det(\vec{s}_\mu, \vec{s}_\nu, \vec{s}_\lambda) = c \tag{161 d}$$

für alle $\vec{s}_1, \dots, \vec{s}_N$ gilt, dann müssen alle Koeffizienten in dieser Gleichung verschwinden.

Beweis
Der Beweis von Lemma A.1 (Gleichung (161 a) bis (161 d)) erfolgt durch vollständige Induktion über die Zahl N der Spins.

Verankerung:

- Gleichung (161 a): $N = 1$. Für $\vec{s}_1$ gilt $\vec{C}_1 \cdot \vec{s}_1 = c$ und für $-\vec{s}_1$ gilt entsprechend $-\vec{C}_1 \cdot \vec{s}_1 = c$. Die Subtraktion der beiden Gleichungen liefert $2\,\vec{C}_1 \cdot \vec{s}_1 = 0$. Deswegen müssen $\vec{C}_1$ und c verschwinden.

- Gleichung (161 b): $N = 2$. Wir wählen die Vektoren $\vec{s}_1$ und $\vec{s}_2$ nicht senkrecht und somit $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \neq 0$. Für $\vec{s}_1, \vec{s}_2$ erhalten wir $C_{12}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = c$ und für $-\vec{s}_1, \vec{s}_2$ erhalten wir entsprechend $-C_{12}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = c$. Die Subtraktion der beiden Gleichungen liefert $2\,C_{12}\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = 0$. Folglich müssen $\vec{C}_{12}$ und c verschwinden.

- Gleichung (161 c) und (161 d): $N = 2$ und $N = 3$. Wir wählen die Vektoren $\vec{s}_1$, $\vec{s}_2$ und $\vec{s}_3$ linear unabhängig. Somit gilt $\vec{s}_1 \times \vec{s}_2 \neq 0$ und $det(\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3) \neq 0$. Für $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$ erhalten wir $\vec{C}_{12} \cdot (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2) = c$ und $C_{123}\, det(\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3) = c$. Für $-\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3$ erhalten wir $-\vec{C}_{12} \cdot (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2) = c$ und $-C_{123}\, det(\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3) = c$. Die Subtraktion der Gleichungen ergibt $2\,\vec{C}_{12} \cdot (\vec{s}_1 \times \vec{s}_2) = 0$ und $2\,C_{123}\, det(\vec{s}_1, \vec{s}_2, \vec{s}_3) = 0$. Deswegen müssen $\vec{C}_{12}$, C_{123} und c verschwinden.

Voraussetzung: Lemma A.1 (Gleichung (161 a) bis (161 d)) gilt für N Spins.

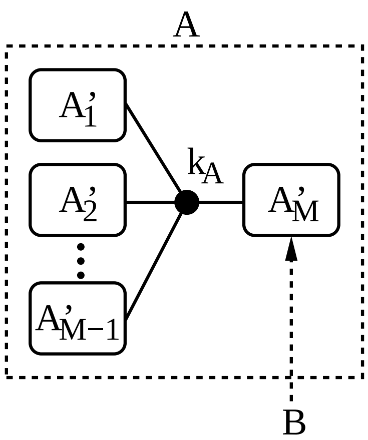
Schritt: Wir betrachten eine der Summen aus Gleichung (161 a) bis (161 d) für $N+1$ Spins. Wir wählen einen beliebigen Spin $\vec{s}_\kappa$ mit $\kappa \in \{1, \ldots, N+1\}$ aus und zerlegen die Summe S in zwei Teile S^1_κ und S^0_κ. Der erste Summand S^0_κ enthalte keine Terme mit $\vec{s}_\kappa$ und der zweite Summand S^1_κ enthalte nur Terme mit $\vec{s}_\kappa$. Es gilt $S = S^0_\kappa + S^1_\kappa = c$ für alle $\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{N+1}$.
Nun ersetzen wir $\vec{s}_\kappa$ durch $-\vec{s}_\kappa$ und lassen alle anderen Vektoren unverändert. Dadurch ändern alle Skalar-, Vektor- bzw. Spatprodukte, die den Spin $\vec{s}_\kappa$ enthalten, das Vorzeichen. Deswegen ändert jeder Term in S^1_κ und somit der gesamte Summand S^1_κ das Vorzeichen. S^0_κ enthält keine Terme mit $\vec{s}_\kappa$ und behält damit das Vorzeichen. Folglich gilt $S^0_\kappa - S^1_\kappa = c$ für alle $\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{N+1}$.
Zusammen mit $S^0_\kappa + S^1_\kappa = c$ folgt $S^0_\kappa = c$ für alle $\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_{N+1}$.
Weil die Summation in S^0_κ nur über N Spins läuft, können wir auf diesen Summanden die Induktionsvoraussetzung anwenden. Deswegen müssen alle Koeffizienten von S^0_κ verschwinden. Dies sind alle Koeffizienten, die nicht den Index κ haben. Da die Wahl von $\vec{s}_\kappa$ beliebig ist, müssen alle Koeffizienten in den Summanden $S^0_1, \ldots, S^0_{N+1}$ und folglich in der gesamten Summe S verschwinden. $\square$

A.3 Zusammenhängende Graphen

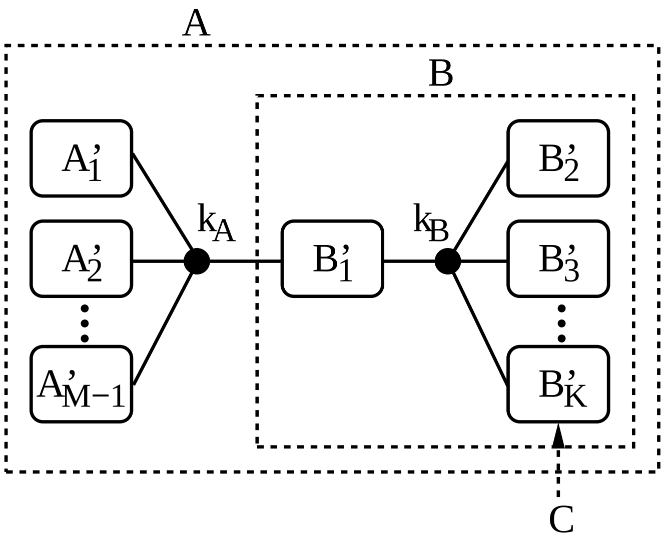
Lemma A.2 *Aus jedem zusammenhängenden Graphen läßt sich ein Knoten entfernen, so dass der verbleibende Teilgraph wieder zusammenhängend ist.*

Beweis
A sei ein zusammenhängender Graph mit N Knoten.

1. Wir entfernen einen beliebigen Knoten k_A aus dem Graphen A. Wenn der verbleibende Teilgraph A' zusammenhängend ist, dann ist Lemma A.2 gültig. Andernfalls zerfällt A' in zusammenhängende Teilgraphen $A'_1, \ldots, A'_M$, die nur über den Knoten k_A miteinander verbunden waren. Wir wählen einen der Teilgraphen $A'_1, \ldots, A'_M$ aus. Dieser Graph heiße B. Dann fügen wir den Knoten k_A wieder in den Graphen A ein.



2. Wenn alle Knoten von B mit dem Knoten k_A verbunden sind, dann können wir einen beliebigen Knoten aus B und damit aus A entfernen und Lemma A.2 stimmt. Andernfalls entfernen wir einen Knoten k_B von B, der nicht mit k_A koppelt. Wenn der verbleibende Teilgraph B' zusammenhängend ist, dann gilt Lemma A.2. Andernfalls zerfällt B' in zusammenhängende Teilgraphen $B'_1, \ldots, B'_K$, die nur über den Knoten k_B miteinander verbunden waren. Deswegen können wir einen der Teilgraphen $B'_1, \ldots, B'_K$ auswählen, der nicht mit k_A koppelt. Dieser Graph heiße C. Dann fügen wir den Knoten k_B wieder in den Graphen B und damit in den Graphen A ein.



3. Wir führen Schritt 2 für den Teilgraphen C aus. Dabei übernimmt B die Rolle von A und C die Rolle von B.

Auf diese Weise durchlaufen wir eine Schleife. In jedem Durchgang verringert sich die Anzahl der Knoten in C. Die Schleife wird spätestens dann beendet, wenn C nur noch aus einem einzigen Knoten besteht. Diesen Knoten können wir aus dem Graphen A entfernen, so dass der verbleibende Teilgraph A' zusammenhängend ist. $\square$

A.4 Exponentialdarstellung des Flusses

Aufgrund des Liouvilleschen Satzes bleiben für ein System von N klassischen Spins die Volumen im Phasenraum

$$\mathcal{P} = \{s = (\vec{s}_1, \ldots, \vec{s}_N) \,\text{mit}\, \vec{s}_\mu \in \mathbb{R}^3 \,\text{und}\, |\vec{s}_\mu| = 1 \,\text{für}\, \mu = 1, \ldots, N\} \tag{162}$$

unter dem Fluss $F_t : \mathcal{P} \to \mathcal{P}$ eines Hamiltonschen Vektorfeldes V konstant, wobei Volumen durch Integrale mit der Volumenform $d\varphi_1\, dz_1 \ldots d\varphi_N\, dz_N$ (kanonische Koordinaten) berechnet werden.
Gemäß [8, S.433 f] erzeugt der volumentreue Fluss $\mathcal{F}_t$ eine einparametrige unitäre Gruppe auf dem Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{P})$ der quadratintegrablen Funktionen $f : \mathcal{P} \to \mathbb{R}$:

$$\mathbb{U}_t\, f = f \circ \mathcal{F}_{-t} \tag{163}$$

Eine einparametrige unitäre Gruppe ist ein Homomorphismus $t \to \mathbb{U}_t$ von $\mathbb{R}$ in die Gruppe der unitären Operatoren auf $\mathcal{H}$. Nach Aussage des Stoneschen Satzes besitzt eine einparametrige unitäre Gruppe einen selbstadjungierten Erzeuger $\mathbb{A}$ [8, S.541 f] mit

$$\mathbb{U}_t = \exp(\mathbb{A}\, t). \tag{164}$$

Die Komponenten s_μ^i $(i = 1, 2, 3)$ der klassischen Spins $\vec{s}_\mu$ $(\mu = 1, \ldots, N)$ stellen quadratintegrable Funktionen auf dem Phasenraum $\mathcal{P}$ dar.

$$s_\mu^i : \mathcal{P} \to \mathbb{R} \tag{165}$$

Aufgrund von Gleichung (163) und (164) gilt

$$\mathbb{U}_t\, s_\mu^i = \exp(\mathbb{A}\, t)\, s_\mu^i = s_\mu^i \circ \mathcal{F}_{-t}. \tag{166}$$

$f_0 : \mathcal{P} \to \mathbb{R}^{3N}$ sei diejenige Funktion, die jeden Phasenraum-Punkt s_0 auf sich selbst abbildet.

$$f_0 = \begin{pmatrix} s_1^1 \\ \vdots \\ s_N^3 \end{pmatrix}^{6} \tag{167}$$

[6] Die Vektoren und Matrizen in Gleichung (167) bis (169) stellen Tensorprodukte dar.

Aufgrund von Gleichung (166) gilt

$$f_0 \circ \mathcal{F}_{-t} \tag{168 a}$$

$$= \begin{pmatrix} s_1^1 \circ \mathcal{F}_{-t} \\ \vdots \\ s_N^3 \circ \mathcal{F}_{-t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{U}_t\, s_1^1 \\ \vdots \\ \mathbb{U}_t\, s_N^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{U}_t & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mathbb{U}_t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1^1 \\ \vdots \\ s_N^3 \end{pmatrix} \tag{168 b}$$

$$\equiv \tilde{\mathbb{U}}_t\, f_0. \tag{168 c}$$

Der Operator $\tilde{\mathbb{U}}_t$ ist unitär und hat einen selbstadjungierten Erzeuger $\tilde{\mathbb{A}}$.

$$\tilde{\mathbb{U}}_t = \exp(\tilde{\mathbb{A}}\, t) = \exp \begin{pmatrix} \mathbb{A} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mathbb{A} \end{pmatrix} t \tag{169}$$

Für einen Phasenraum-Punkt s_0 gilt

$$\Big(\tilde{\mathbb{U}}_t f_0\Big)(s_0) = \Big(\exp(\tilde{\mathbb{A}}\, t)\, f_0\Big)(s_0) = f_0(\mathcal{F}_{-t}\, s_0). \tag{170}$$

Die Ersetzung $t \to -t$ liefert die Zeitentwicklung

$$s(t) = \mathcal{F}_t\, s_0 = \Big(\exp(-\tilde{\mathbb{A}}\, t)\, f_0\Big)(s_0). \tag{171}$$

Anschaulich gesprochen wirkt der Fluss $\mathcal{F}_t$ auf den Phasenraum-Punkt s_0 wie der "Funktionenfluss" $\exp(-\tilde{\mathbb{A}}\, t)$ auf den "Funktionenpunkt" f_0. Auf diese Art und Weise wird deutlich, dass sich der Fluss $\mathcal{F}_t$ als Exponentialfunktion darstellen lässt und einen Erzeuger $-\mathbb{B}$ hat, der auf den Phasenraum-Punkt s_0 wirkt wie der Erzeuger $-\tilde{\mathbb{A}}$ auf den "Funktionenpunkt" f_0.

$$\mathbb{B}\, s_0 = \Big(\tilde{\mathbb{A}}\, f_0\Big)(s_0) \tag{172}$$

Zusammenfassend gilt:

$$s(t) = \mathcal{F}_t\, s_0 = \exp(-\mathbb{B}\, t)\, s_0 \tag{173}$$

A.5 Zerlegung von Exponentialoperatoren

Zwei Operatoren $\mathbb{A}$ und $\mathbb{B}$ vertauschen im allgemeinen nicht: $\mathbb{A}\,\mathbb{B} \neq \mathbb{B}\,\mathbb{A}$. Somit ist $e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta} \neq e^{\mathbb{A}\,\Delta}\,e^{\mathbb{B}\,\Delta}$. Aus diesem Grund gehen wir für die Zerlegung des Exponentialoperators $e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta}$ von einem einfachen Ansatz der Form

$$e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta} = e^{a\,\mathbb{A}\,\Delta}\,e^{b\,\mathbb{B}\,\Delta} + \mathcal{O}(\Delta^{K+1}) \tag{174}$$

aus und wählen die beiden Parameter a und b geeignet, um das größte K zu gewährleisten. Dazu entwickeln wir die Exponentialoperatoren auf beiden Seiten der Gleichung in eine Reihe. Die Reihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung von Δ liefert für den Operator $e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta}$ den Ausdruck

$$1 + (\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta + \frac{(\mathbb{A}+\mathbb{B})^2}{2}\,\Delta^2 + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{175}$$

Beachten wir $(\mathbb{A}+\mathbb{B})^2 \neq \mathbb{A}^2 + \mathbb{B}^2 + 2\,\mathbb{A}\,\mathbb{B}$, so steht auf der linken Seite der Gleichung

$$1 + (\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta + \frac{(\mathbb{A}^2 + \mathbb{B}^2 + \mathbb{A}\,\mathbb{B} + \mathbb{B}\,\mathbb{A})}{2}\,\Delta^2 + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{176}$$

Durch die Reihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung von Δ erhalten wir für den Operator $e^{a\,\mathbb{A}\,\Delta}$ den Ausdruck

$$1 + a\,\mathbb{A}\,\Delta + \frac{a^2\mathbb{A}^2}{2}\,\Delta^2 + \mathcal{O}(\Delta^3) \tag{177}$$

und für den Operator $e^{b\,\mathbb{B}\,\Delta}$ den entsprechenden Ausdruck

$$1 + b\,\mathbb{B}\,\Delta + \frac{b^2\,\mathbb{B}^2}{2}\,\Delta^2 + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{178}$$

Berücksichtigen wir bei der Multiplikation die Reihenfolge von $e^{a\,\mathbb{A}\,\Delta}$ und $e^{b\,\mathbb{B}\,\Delta}$, so steht auf der rechten Seite der Gleichung

$$1 + (a\,\mathbb{A} + b\,\mathbb{B})\,\Delta + \frac{a^2\mathbb{A}^2 + b^2\,\mathbb{B}^2 + 2\,a\,b\,\mathbb{A}\,\mathbb{B}}{2}\,\Delta^2 + \mathcal{O}(\Delta^3). \tag{179}$$

Nun vergleichen wir auf der linken und der rechten Seite der Gleichung die Koeffizienten vor gleichen Potenzen von Δ und erhalten auf diese Art und

Weise eine Gleichung für die erste Ordnung

$$(a-1)\,\mathbb{A} + (b-1)\,\mathbb{B} = 0 \tag{180}$$

und eine Gleichung für die zweite Ordnung

$$(a^2-1)\,\mathbb{A}^2 + (b^2-1)\,\mathbb{B}^2 + (2\,a\,b-1)\,\mathbb{A}\,\mathbb{B} + (0-1)\,\mathbb{B}\,\mathbb{A} = 0. \tag{181}$$

Da diese beiden Gleichungen für alle Operatoren $\mathbb{A}$ und $\mathbb{B}$ gelten, müssen die Koeffizienten vor denjenigen Kombinationen von $\mathbb{A}$ und $\mathbb{B}$ verschwinden, in denen die Operatoren in gleicher Reihenfolge auftreten. Somit erhalten wir das eindeutig lösbare Gleichungssystem für die erste Ordnung

$$\begin{aligned} a &= 1 && \text{(182 a)} \\ b &= 1 && \text{(182 b)} \end{aligned}$$

und das nicht lösbare Gleichungssystem für die zweite Ordnung

$$\begin{aligned} a^2 &= 1 && \text{(183 a)} \\ b^2 &= 1 && \text{(183 b)} \\ 2\,a\,b &= 1 && \text{(183 c)} \\ 0 &= 1. && \text{(183 d)} \end{aligned}$$

Folglich können wir mit dem gewählten Ansatz eine Übereinstimmung in der ersten Ordnung, aber nicht in der zweiten Ordnung von Δ erreichen.

$$e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta} = e^{\mathbb{A}\,\Delta}\, e^{\mathbb{B}\,\Delta} + \mathcal{O}(\Delta^2) \tag{184}$$

Gehen wir für die Zerlegung des Exponentialoperators $e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta}$ von einem anderen Ansatz der Form

$$e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta} = e^{a_1\,\mathbb{A}\,\Delta}\, e^{b_1\,\mathbb{B}\,\Delta}\, e^{a_2\,\mathbb{A}\,\Delta}\, e^{b_2\,\mathbb{B}\,\Delta} + \mathcal{O}(\Delta^{K+1}) \tag{185}$$

mit den Parametern a_1, b_1, a_2 und b_2 aus, so erhalten wir über eine ähnliche

Rechnung das Gleichungssystem für die erste Ordnung

$$a_1 + a_2 = 1 \tag{186 a}$$
$$b_1 + b_2 = 1 \tag{186 b}$$

und das Gleichungssystem für die zweite Ordnung

$$(a_1 + a_2)^2 = 1 \tag{187 a}$$
$$2\,a_1\,(a_2 + b_1) + 2\,a_2\,b_2 = 1 \tag{187 b}$$
$$2\,a_2\,b_1 = 1 \tag{187 c}$$
$$(b_1 + b_2)^2 = 1. \tag{187 d}$$

Diese beiden Gleichungssysteme haben eine gemeinsame, eindimensionale Lösung: $a_1 = 1 - 1/(2 - 2\,b_2)$, $a_2 = 1/(2 - 2\,b_2)$ und $b_1 = 1 - b_2$. Da das Gleichungssystem für die dritte Ordnung

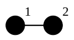
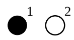
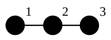
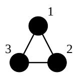
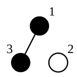
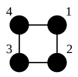
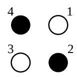
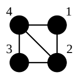
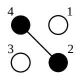
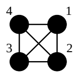
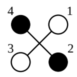
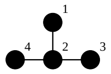
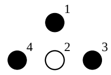
$$(a_1 + a_2)^3 = 1 \tag{188 a}$$
$$6\,a_1\,a_2\,b_2 + 3\,a_2^2\,b_2 + 3\,a_1^2\,(b_1 + b_2) = 1 \tag{188 b}$$
$$6\,a_1\,a_2\,b_1 = 1 \tag{188 c}$$
$$3\,a_2\,b_2^2 + 3\,a_1\,(b_1 + b_2)^2 = 1 \tag{188 d}$$
$$3\,a_2^2\,b_1 = 1 \tag{188 e}$$
$$6\,a_2\,b_1\,b_2 = 1 \tag{188 f}$$
$$3\,a_2\,b_1^2 = 1 \tag{188 g}$$
$$(b_1 + b_2)^3 = 1 \tag{188 h}$$

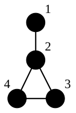
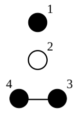
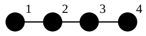
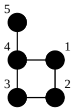
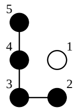
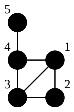
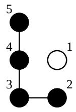
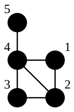
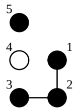
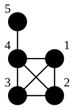
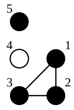
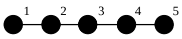
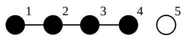
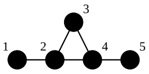
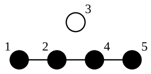
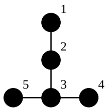
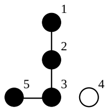
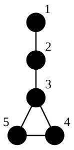
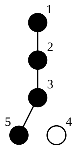
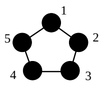
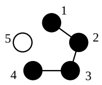
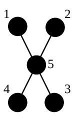
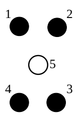
keine Lösung hat, erhalten wir mit dem gewählten Ansatz eine Zerlegung zweiter Ordnung. Zum Beispiel liefert $b_2 = 0$ die Suzuki-Trotter-Zerlegung.

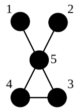
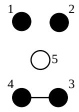
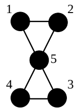
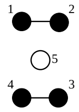
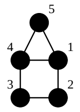
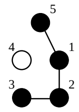
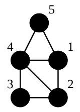
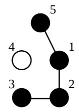
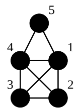
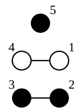
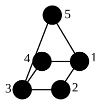
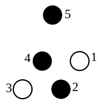
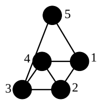
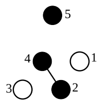
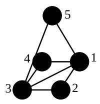
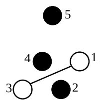
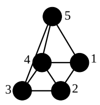
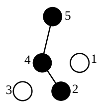
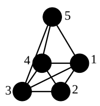
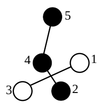
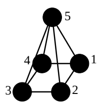
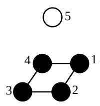
$$e^{(\mathbb{A}+\mathbb{B})\,\Delta} = e^{\mathbb{A}\,\Delta/2}\,e^{\mathbb{B}\,\Delta}\,e^{\mathbb{A}\,\Delta/2} + \mathcal{O}(\Delta^3) \tag{189}$$

A.6 Übersicht Heisenberg-Graphen

In Tabelle 1 sind alle zusammenhängenden Heisenberg-Graphen bis $N = 5$ Spins aufgeführt. Die Systeme sind in Form einer Abbildung angegeben. In dieser Abbildung sind die Spins durch Kreise und die Wechselwirkung zwischen den Spins durch Linien dargestellt.
Für jedes System ist ein Satz unabhängiger, vertauschbarer Erhaltungsgrößen angegeben. Abhängig davon, ob ein Graph Heisenberg-integrabel ist oder nicht, sind $N-1$ oder weniger unabhängige, vertauschbare Heisenberg-Konstanten angegeben. Hierbei wird die verkürzte Schreibweise $s_{ij}^2 = \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ verwendet. Die Heisenberg-Integrabilität der Systeme ist zusätzlich vermerkt.
Für jeden Heisenberg-integrablen Graphen ist eine mögliche Zerlegung in gleichförmig gekoppelte Teilsysteme angegeben. Dagegen ist für Graphen, die nicht Heisenberg-integrabel sind, die Zerlegung so gewählt, dass ein Teilsystem die 4er-Kette ist. In beiden Fällen ist die Zerlegung in Form einer Abbildung angegeben. In dieser Abbildung sind die Teilsysteme durch weiße und schwarze Kreise gekennzeichnet.
In Tabelle 2 ist für die nicht Heisenberg-integrablen Graphen aus Tabelle 1 eine mögliche Darstellung als Summe von zwei Heisenberg-integrablen Graphen dargestellt. Diese Darstellung erfolgt ebenfalls in Form einer Abbildung. In dieser Abbildung sind die beiden Heisenberg-integrablen Graphen durch getrichelte und durchgezogene Linien gekennzeichnet.

N	System	Erhaltungsgrößen	Eigenschaft	Zerlegung
1		$S^{(3)}$	integrabel	
2		H, $S^{(3)}$	integrabel	
3		H, $S^{(3)}$, s_{13}^2	integrabel	
		H, $S^{(3)}$, s_{13}^2	integrabel	
4		H, $S^{(3)}$, s_{13}^2, s_{24}^2	integrabel	
		H, $S^{(3)}$, s_{13}^2, s_{24}^2	integrabel	
		H, $S^{(3)}$, s_{13}^2, s_{24}^2	integrabel	
		H, $S^{(3)}$, s_{34}^2, $s_{13}^2 + s_{14}^2$	integrabel	

		$H,\ S^{(3)},\ s_{34}^2,\ s_{13}^2+s_{14}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{24}^2$		
5		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2+s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2+s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{12}^2+s_{23}^2,\ s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{12}^2+s_{23}^2,\ s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{15}^2+s_{24}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{15}^2+s_{24}^2+s_{25}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{15}^2+s_{24}^2+s_{25}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{24}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{12}^2,\ s_{34}^2,\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{23}^2+s_{24}^2$	integrabel	

		$H,\ S^{(3)},\ s_{12}^2,\ s_{34}^2,\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{23}^2+s_{24}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{12}^2,\ s_{34}^2,\ s_{13}^2+s_{14}^2+s_{23}^2+s_{24}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{24}^2+s_{25}^2+s_{35}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2+s_{25}^2+s_{35}^2,\ s_{14}^2+s_{24}^2+s_{34}^2+s_{45}^2$		
		$H,\ S^{(3)},\ s_{14}^2,\ s_{23}^2,\ s_{25}^2+s_{35}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{25}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{25}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{25}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{25}^2,\ s_{24}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{25}^2,\ s_{24}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2+s_{45}^2$	integrabel	

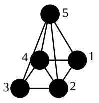
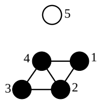
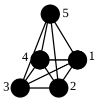
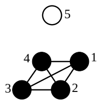
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2+s_{45}^2$	integrabel	
		$H,\ S^{(3)},\ s_{13}^2,\ s_{24}^2,\ s_{15}^2+s_{25}^2+s_{35}^2+s_{45}^2$	integrabel	

Tabelle 1: Heisenberg-Graphen bis $N = 5$ Spins.

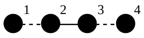
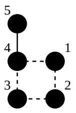
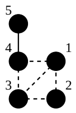
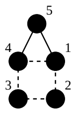
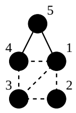
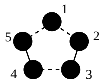
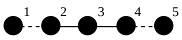
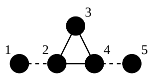
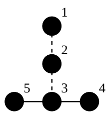
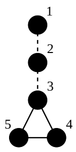
N	Systeme
4	
5	        

Tabelle 2: Darstellung als Summe von zwei Heisenberg-integrablen Graphen.

Literatur

[1] Schröder, Christian: *Numerische Simulation zur Thermodynamik magnetischer Strukturen mittels deterministischer und stochastischer Wärmebadankopplung.* Dissertation, Universität Osnabrück, 1999.

[2] Mentrup, Detlef: *Untersuchungen zu kleinen Heisenberg-Systemen.* Diplomarbeit, Universität Osnabrück, 1999.

[3] V.I.Arnold: *Mathematical Methods of Classical Mechanics.* New York, Heidelberg, Berlin: Springer–Verlag, 1978.

[4] E.Magyari, H.Thomas, R.Weber, C.Kaufman und G.Müller: *Integrable and Nonintegrable Classical Spin Clusters.* Condensed Matter 65, 363–374, 1987.

[5] M.Ameduri, B.Gerganov, R.A.Klemm: *Classification of integrable clusters of classical Heisenberg spins.* Preprint cond-mat/0502323.

[6] S.Tsai, M.Krech, D.P.Landau: *Symplectic Integration Methods in Molecular and Spin Dynamics Simulations.* Brazilian Journal of Physics 34 2A, 384–391, 2004.

[7] E.Hairer, C.Lubich, G.Wanner: *Geometric Numerical Integration.* New York, Heidelberg, Berlin: Springer–Verlag, 2002.

[8] R.Abraham, J.E.Marsden, T.S.Ratiu: *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications.* London: Addison–Wesley, 1983.

[9] Schmidt, Heinz-Jürgen: *Klassische Spinsysteme.* Vorlesung, Universität Osnabrück, 2004.

[10] W.-H.Steeb, A.Kunick: *Chaos in dynamischen Systemen.* Mannheim: BI–Wissenschaftsverlag, 1989.

[11] H.G.Schuster: *Deterministisches Chaos – Eine Einführung.* Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft, 1994.

[12] D.Laugwitz: *Differentialgeometrie.* Stuttgart: B.G. Teubner, 1977.

Danksagung

Die vorliegende Diplomarbeit ist in der Forschungsgruppe “Makroskopische Systeme und Quantentheorie“ des Fachbereichs Physik an der Universität Osnabrück entstanden.

Ich möchte mich an dieser Stelle bei der gesamten Arbeitsgruppe für die gute Zusammenarbeit bedanken. Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Schmidt, der mein Interesse für die Thematik der “klassischen Spin-Systeme“ geweckt hat und sich dazu bereit erklärt hat, die Betreuung meiner Diplomarbeit zu übernehmen. Darüber hinaus hat Prof. Dr. Schmidt durch eine Vielzahl von wertvollen Anregungen wesentlich zu dem Gelingen meiner Diplomarbeit beigetragen. Geholfen haben mir auch Mirko Brüger und Peter Hage, sei es durch die Bewältigung von technischen Schwierigkeiten oder durch die Diskussion von mathematischen und physikalischen Fragestellungen.

Zum Abschluss möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, insbesondere bei meinen Eltern und meinem Bruder sowie bei Björn Heinzmann, Sebastian Finke und Michaela Lemmer.

Erklärung

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

Osnabrück, im April 2005

– Robin Steinigeweg –