

**Analytische Verfahren zur Untersuchung von  
Quantenspinsystemen:  
rotationsinvariante Greenfunktionsmethode  
und lineare Spinwellentheorie**

**DISSERTATION**

**zur Erlangung des akademischen Grades**

**doctor rerum naturalium  
(Dr. rer. nat.),**

**genehmigt durch  
die Fakultät für Naturwissenschaften  
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg**

**von Diplom-Physiker Dirk P. Schmalfuß**

**geboren am 26.01.1972 in Freiberg**

Gutachter: Prof. Dr. Johannes Richter, Magdeburg  
Prof. Dr. Dieter Ihle, Leipzig  
Prof. Dr. Harald Böttger, Magdeburg

eingereicht am: 20.09.2004  
verteidigt am: 08.02.2005

**Wenn du keine Zeit hast, dann jage keinen Büffel.**

*Sprichwort aus Tansania*

## Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei all denen bedanken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben.

Dabei gilt mein besonderer Dank Herrn Prof. Dr. J. Richter. Er hat mir nicht nur die Möglichkeit der Mitarbeit in seiner Arbeitsgruppe eingeräumt, sondern mich auch mit viel Geduld, Wohlwollen und die stete Bereitschaft zur Diskussion in vielfältiger Weise unterstützt. Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr. D. Ihle aus Leipzig, dessen umgängliche Art mir im Rahmen unserer Kooperation das Vertrautwerden mit einer mir bis dahin unbekannten Methode wesentlich erleichtert hat.

Ich bin außerdem den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe "Theorie der kondensierten Materie II" zu Dank verpflichtet. Insbesondere betrifft dies Herrn Dr. J. Schulenburg. Seiner Hilfsbereitschaft ist es zuzuschreiben, daß ich meine anfängliche "Scheu" vor moderner Rechentechnik überwinden konnte und mittlerweile über grundlegende Programmierkenntnisse verfüge. Ich möchte auch Herrn Dipl.-Phys. R. Schmidt erwähnen, der mir so manches Bier ausgegeben und so manche Zigarette spendiert hat.

Viel Unterstützung habe ich auch durch Yvonne erfahren. In Phasen, wo es nicht mehr weiterzugehen schien, stand sie mir zur Seite, um mich zu ermuntern und anzuspornen. Vor allem aber bin ich meinem Vater und meiner inzwischen verstorbenen Mutter dankbar. Beide haben das Interesse für die Natur in mir geweckt und mich stets gefördert.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einführung</b>	<b>3</b>
<b>2 Die lineare Spinwellentheorie</b>	<b>9</b>
2.1 Allgemeine Betrachtungen . . . . .	9
2.1.1 Die Holstein-Primakoff-Transformation . . . . .	10
2.1.2 Die Bogoliubov-Transformation . . . . .	14
2.2 Das A-B-Gitter . . . . .	22
2.2.1 Das <i>A-B</i> -Modell und sein klassischer Grundzustand . . . . .	23
2.2.2 Lineare Spinwellentheorie für $J_{AB} < 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$ . . . . .	27
2.3 Das Maple-Leaf-Gitter . . . . .	36
2.3.1 HAFM auf dem Dreiecksgitter . . . . .	37
2.3.2 HAFM auf dem Kagomé-Gitter . . . . .	41
2.3.3 Der klassische Grundzustand des HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter . . . . .	42
2.3.4 Lineare Spinwellentheorie für den HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter . . . . .	48
<b>3 Die rotationsinvariante Greenfunktionsmethode</b>	<b>53</b>
3.1 Allgemeine Grundlagen . . . . .	53
3.2 Der Formalismus . . . . .	55
3.2.1 Die Momentenmatrix . . . . .	57
3.2.2 Die Frequenzmatrix . . . . .	59
3.2.3 Korrelationsfunktionen . . . . .	63
3.2.4 Lösungsstrategie . . . . .	66
3.2.5 Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für die lineare Kette	68
3.3 Das geschichtete Kagomé-Gitter . . . . .	74
3.3.1 Der Fall $J_{  } < 0, J_{\perp} < 0$ . . . . .	79
3.3.2 Der Fall $J_{  } < 0, J_{\perp} > 0$ . . . . .	89
3.3.3 Der Fall $J_{  } > 0, J_{\perp} > 0$ . . . . .	94
3.3.4 Der Fall $J_{  } > 0, J_{\perp} < 0$ . . . . .	103

<b>4 Zusammenfassung</b>	<b>112</b>
<b>A Allgemeine Bemerkungen zur RGM</b>	<b>115</b>
A.1 Relationen zwischen verschiedenen Kondensattermen . . . . .	115
A.2 Vertexpараметer und ihre Rolle bei der Optimierung der RGM-Resultate	116
A.3 Korrelationslänge . . . . .	118
A.4 Nichtlineares Gleichungssystem im Tieftemperaturregime . . . . .	120
<b>B LSWT für das Quadratgitter mit modifizierten Kopplungen</b>	<b>124</b>
<b>C Numerische Integration</b>	<b>128</b>

# Kapitel 1

## Einführung

Im Jahre 1928 erkannte Heisenberg [1] in der Austauschkopplung eine mögliche quantenmechanische Ursache für das Auftreten von Ferromagnetismus in isolierenden Festkörpern<sup>1</sup>. In Isolatoren spielen magnetische Bahnmomente nur eine untergeordnete Rolle, weil die Elektronen an den Atomrumpfen mehr oder weniger lokalisiert sind; bekanntlich ist aber mit dem Elektronenspin ein zusätzliches magnetisches Moment verbunden. In dem Bestreben, sich energetisch günstig auszurichten, kommt es zur Ausbildung magnetischer Strukturen. Ein an sich einfacher Modelloperator für ein Spinsystem, der von Dirac vorgeschlagen wurde und der diesem Bild Rechnung trägt, hat die Gestalt

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m,n} J_{m,n} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n. \quad (1.1)$$

Dabei erstreckt sich die Summation über alle Spins  $m$  ( $n$ ), die über ein Austauschintegral  $J_{m,n}$  miteinander wechselwirken<sup>2</sup>. Der Faktor  $1/2$  ist für die Physik unwesentlich. Er soll nur verhindern, daß bei der Summation über alle Spins Bindungen doppelt gezählt werden<sup>3</sup>. Weiterhin werden die Spins durch vektorartige Operatoren  $\mathbf{S}_{m(n)}$  repräsentiert, deren Komponenten der bekannten Drehimpulsalgebra der Quantenmechanik genügen. Neben der Austauschkopplung geht die Spinquantenzahl  $s$  als ein weiterer Parameter in das Modell ein. Sie legt die Länge des betrachteten Spins über  $\langle \mathbf{S}_m^2 \rangle = s(s+1)$  fest<sup>4</sup>. Im Limes  $s \rightarrow \infty$  vollzieht sich wegen  $\lim_{s \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}_m^2 \rangle / s^2 = 1$  formal der Übergang zu einem klassischen Spin, weil dann die Richtungsquartelung praktisch aufgehoben wird und die Spinoperatoren schließlich den Charakter einfacher Vektoren annehmen. Trotzdem ist im allgemeinen genau dann von einem klassischen

---

<sup>1</sup>Das Bohr-van-Leeuwen-Theorem [2] schließt magnetische Ordnung basierend auf rein klassischen Mechanismen bei endlichen Temperaturen aus.

<sup>2</sup>Die Austauschintegrale  $J_{m,n}$  gehen als Modellparameter ein. Ihre Größe kann experimentell abgeschätzt werden. Für die Analyse magnetischer Ordnung ist jedoch ihre genaue zahlenmäßige Kenntnis unerheblich. Wichtig sind das Vorzeichen und gegebenenfalls das Verhältnis verschiedener Kopplungen zueinander.

<sup>3</sup>Wenn über alle Spins summiert wird, dann ist in dieser Arbeit der Hamilton-Operator wie (1.1) mit dem Vorfaktor  $1/2$  versehen. Erfolgt die Summation bezogen auf eine Elementarzelle jedoch nur über nichtäquivalente Kopplungen, so erübrigt sich die Notwendigkeit, diesen Vorfaktor zu berücksichtigen.

<sup>4</sup>Es wird in dieser Arbeit  $\hbar = h/2\pi \equiv 1$  vereinbart. Für einzelne Elektronen gilt  $s = 1/2$ . Wenn im Rahmen der Spinwellentheorie die Spillänge diskutiert wird, dann ist nicht  $\sqrt{s(s+1)}$  gemeint, sondern  $s$ .

Spinsystem die Rede, wenn  $s$  endlich bleibt und die Spinoperatoren als Spinvektoren der Länge  $s$  aufgefaßt werden. Klassische Spins können sich frei im Raum orientieren und unterliegen diesbezüglich keiner Einschränkung. Das Vorzeichen von  $J_{m,n}$  entscheidet darüber, welche gegenseitige Orientierung energetisch begünstigt wird. Gilt  $J_{m,n} < 0$ , so handelt es sich um eine ferromagnetische Bindung, die parallele Ausrichtung bevorzugt. Entsprechend präferieren koppelnde Spins antiparallele Ausrichtung, wenn  $J_{m,n} > 0$  erfüllt ist. Eine solche Bindung wird als antiferromagnetisch bezeichnet. Obwohl (1.1) - im folgenden wird vom Heisenberg-Modell die Rede sein - eine sehr übersichtliche Gestalt hat, ist eine exakte Behandlung nur in Ausnahmefällen möglich. Dennoch gibt es eine Reihe von exakten Aussagen zum Heisenberg-Modell, auf die bei Bedarf in dieser Arbeit näher eingegangen wird. Von prinzipieller Bedeutung für die Lösung eines quantenmechanischen Problems und die Klassifizierung der Eigenzustände ist der Satz vertauschbarer Observabler. Es sind dies der Hamilton-Operator  $H$ , wegen dessen offensichtlicher Rotationssymmetrie im Spinraum das Quadrat des Gesamtspins  $\mathbf{S}^2 = (\sum_m \mathbf{S}_m)^2$  sowie irgendeine Komponente des Gesamtspins; üblicherweise benutzt man hierbei dessen  $z$ -Komponente:  $S^z = \sum_m S_m^z$ .

Seit seiner Formulierung hat das Heisenberg-Modell wesentlich zum theoretischen Verständnis des Festkörpermagnetismus beigetragen<sup>5</sup>. Vielen Festkörpern ist eigen, daß sie eine Gitterstruktur besitzen, welche sich auf das durch (1.1) zu beschreibende Spinsystem überträgt. Die Gitterstruktur hat entscheidenden Einfluß auf die magnetische Ordnung in den betreffenden Festkörpern. So ist es z.B. wichtig, wie groß die Koordinationszahl ist, d.h. zu welchen Nachbarspins das Austauschintegral wesentlich von Null verschieden ist. Ebenfalls von Bedeutung ist die Frage, ob die koppelnden Spins eine ein-, zwei- oder dreidimensionale Struktur bilden. Bestimmend sind außerdem die Vorzeichen der Austauschintegrale sowie die Größe von  $s$  und die damit verbundene Stärke der Quantenfluktuationen<sup>6</sup>. Daß auch die Halb- oder Ganzzahligkeit von  $s$  zumindest in eindimensionalen Spinsystemen ausschlaggebend sein kann, konnte Haldane zeigen [4]. Ein weiterer, für die magnetische Ordnung relevanter Mechanismus ist die Frustration. Frustration liegt genau dann vor, wenn bei gegebenem Hamilton-Operator (1.1) nicht alle Bindungen gleichzeitig ihrem Vorzeichen entsprechend befriedigt werden können. Ursache dafür kann die Gittergeometrie sein. Denkbar sind aber auch Kopplungsverhältnisse mit konkurrierenden Bindungen. Tendenziell bewirken Frustration und Quantenfluktuationen eine Destabilisierung magnetischer Ordnung bis hin zu deren Verschwinden. Dies gilt im allgemeinen genauso für thermische Fluktuationen. Aber auch hier trifft der Grundsatz zu, wonach es keine Regel ohne Ausnahme gibt. So können unter bestimmten Voraussetzungen gerade Fluktuationen - seien sie quantenmechanischen oder thermischen Ursprungs - dafür sorgen, daß sich der Grad magnetischer Ordnung im Spinsystem erhöht. Derartige Phänomene faßt man unter dem Begriff *order-from-disorder* zusammen [5, 6]. Ein sehr illustratives Beispiel, das

---

<sup>5</sup>Es sei nochmals betont, daß sich die Anwendbarkeit des Heisenberg-Modells vor allem auf Isolatoren erstreckt; auf jene Festkörper also, deren Elektronen an den Atomrumpfen lokalisiert sind. Lokalisierte Elektronen bilden entsprechend ihrer Verteilung auf den atomaren Energieniveaus ein effektives  $s$ , welches als solches in das Heisenberg-Modell eingeht und natürlich von  $s = 1/2$  abweichen kann. Ein allgemeineres Modell, welches mit einem kinetischen Term das "Hüpfen" der Elektronen von Platz zu Platz berücksichtigt und das Heisenberg-Modell als Grenzfall beinhaltet, geht auf Hubbard [3] zurück.

<sup>6</sup>Der Begriff der Quantenfluktuationen erfaßt pauschal den Grad der Unbestimmtheit, dem quantenmechanische Größen unterworfen sind.

verdeutlicht, wie Fernordnung erst durch die Existenz von Quantenfluktuationen zu stande kommt, ist das des  $J_1$ - $J_2$ -Modells auf dem Quadratgitter im Limes eines gegenüber  $J_1$  vergleichsweise starken  $J_2$ . Wie sich in diesem Fall zeigen läßt, bevorzugen Quantenfluktuationen energetisch diejenigen Zustände, die einer kolinearen Spinorientierung entsprechen; klassisch entkoppelte Spins korrelieren im extremen Quantenfall miteinander, Fernordnung entsteht [7]. Andererseits unterdrücken erhöhte Dimension und Koordinationszahl den an sich ordnungsmindernden Einfluß von Fluktuationen jeglicher Art, weshalb hochkoordinierte und höherdimensionale Spinsysteme ohne Frustration eher zu magnetischer Ordnung neigen. Letztendlich ist jedoch die Existenz magnetischer Ordnung als kollektives Phänomen ein Ergebnis des Zusammenspiels verschiedenster, miteinander konkurrierender Faktoren. Das Heisenberg-Modell ist somit reich an interessanter Physik.

In den achtziger Jahren des letzten Jahrhunderts hat die Beschäftigung mit dem Heisenberg-Modell im Zusammenhang mit der Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung [8] in den zur Familie der Kuprate gehörenden Materialien, wie dotiertem  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ , eine Renaissance erfahren. Nach Anderson [9] könnte dieses neuartige Phänomen, das sich mit seinen ungewöhnlich hohen Sprungtemperaturen einer BCS-artigen [10] Erklärung zu entziehen scheint, durch starke Elektronenkorrelationen in den charakteristischen  $CuO$ -Ebenen hervorgerufen sein. Diese Frage konnte bis heute noch nicht eindeutig entschieden werden. Als gesichert gilt jedoch, daß sich undotiertes  $La_2CuO_4$  hinsichtlich seiner magnetischen Eigenschaften ausgesprochen gut durch einen Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagneten auf einem Quadratgitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung beschreiben läßt<sup>7</sup>. Motiviert durch diesen experimentellen Befund und angeregt durch die Synthese weiterer Substanzen, stieg in den Jahren danach das Interesse an Quantenspinsystemen sprunghaft, was sich in der Zahl der Publikationen zu diesem Thema niederschlägt [11, 12, 13, 14]. Dabei sind das Heisenberg-Modell und seine Modifikationen nicht allein wegen ihrer möglichen Relevanz für eine ausgezeichnete Stoffgruppe Gegenstand intensiver Forschungen, sondern - und das in zunehmendem Maße - auch deswegen, weil Quantenspinsysteme Modellcharakter für wechselwirkende Quantenvielteilchensysteme besitzen, deren Untersuchung eine nicht unerhebliche theoretische Herausforderung darstellt. Es ist bereits weiter oben erwähnt worden, daß eine exakte Behandlung des Heisenberg-Modells nahezu ausgeschlossen ist. Realistische Problemstellungen sind also nur approximativ zugänglich. Umso mehr ist der Tatsache Bedeutung beizumessen, daß eine ganze Fülle geeigneter Näherungsmethoden existiert, deren Resultate miteinander zu vergleichen sind. Erst dadurch gelangt man zu gültigen Aussagen; ein Näherungsverfahren allein kann schwerlich alle relevanten physikalischen Aspekte abdecken. Umgekehrt lassen sich erst durch den Vergleich ihrer Resultate Güte und Aussagekraft der einzelnen Methoden beurteilen, wovon viele über die Theorie des Magnetismus hinaus in der Physik Verwendung finden.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen zwei analytische Verfahren, die teilweise vergleichend auf verschiedene, durch das Heisenberg-Modell beschriebene Quantenspinsysteme angewendet werden. Es sind dies die lineare Spinwellentheorie (LSWT) sowie die rotationsinvariante Greenfunktionsmethode (RGM). Jede dieser Methoden besitzt ihre spezifischen Vor- und Nachteile. Während die Spinwellentheorie auf Quantenspinsy-

---

<sup>7</sup>Aufgrund der Elektronenkonfiguration besitzt jedes  $Cu$ -Atom effektiv den Spin 1/2.

steme zugeschnitten ist, in denen tatsächlich quasiklassische Ordnung vorliegt, erweist sich die Greenfunktionsmethode besonders dann als geeignet, wenn das Spinsystem kurzreichweitig geordnet ist. Gegenüber der LSWT besitzt die RGM den Vorzug, daß innerhalb desselben mathematischen Apparates Ordnung und Unordnung gleichermaßen beschrieben werden können; bekanntlich funktioniert die LSWT - dann allerdings sehr gut und besser als die RGM - vor allem in Quantenpinsystemen mit quasiklassischer Ordnung fern jener Parameterregionen, wo das Auftreten von Phasenübergängen hin zu ungeordneten Strukturen möglich wird<sup>8</sup>. Ein weiterer Vorzug der RGM besteht darin, daß sich ihre Resultate mittels freier Parameter, die beim Aufstellen der Gleichungen zusätzlich auftreten, anpassen lassen. Fernordnung wird in beiden Theorien unterschiedlich definiert. Im Rahmen der LSWT ist ein Spinssystem genau dann fernenordnet, wenn der Erwartungswert der lokalen  $z$ -Komponente eines Spins existiert und positiv ist<sup>9</sup>. Die  $z$ -Komponente eines Spins spielt in der LSWT aufgrund der Transformationsregeln und der damit verbundenen Symmetriebrechung eine gesonderte Rolle, obwohl das Heisenberg-Modell rotationssymmetrisch ist. Der Rotationssymmetrie des Modells wird die RGM eher gerecht, wobei zusätzlich das Verschwinden von  $\langle S_{\mathbf{R}}^z \rangle$  an jedem Platz  $\mathbf{R}$  explizit gefordert wird. Man spricht hier von Fernordnung, wenn Korrelationsfunktionen mit zunehmendem Abstand nicht auf Null abklingen, sondern gegen einen endlichen Grenzwert streben. Zwischen beiden Theorien besteht trotzdem ein enger Zusammenhang; auch in der RGM sind z.B. die Anregungen spinwellenartig. Es ist ein Anliegen des Autors, diesen Zusammenhang im Rahmen dieser Arbeit, zu deren Schwerpunkten die ausführliche und möglichst detaillierte Darstellung der formal mathematischen Aspekte beider Theorien zählt, zu betonen. Sowohl die RGM als auch die LSWT werden, was die technische Seite betrifft, auf Gitter mit Basis erweitert, um konkrete Quantenspinsysteme auf verschiedenen und zum Teil komplizierten Gittertypen untersuchen zu können. Studiert wird das weiter oben schon erwähnte Wechselspiel von Frustration, Gittergeometrie und Gitterdimension mit seinen Konsequenzen für die magnetische Ordnung in Anwesenheit von starken Quantenfluktuationen. So beschäftigt sich diese Arbeit mit dem Heisenberg-Antiferromagneten (HAFM) auf dem  $A$ - $B$ -Gitter. Die geometrische Struktur dieses Gitters ist in der Natur tatsächlich realisiert<sup>10</sup>. Zwischen einem einfachen Modell, welches die Existenz zweier Untersysteme  $A$  und  $B$  berücksichtigt und eine frustrierende Kopplung  $J_{AB}$  einschließt, und dem  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem Quadratgitter besteht eine enge Beziehung. Klassisch ähnelt der Fall schwacher Frustration im  $A$ - $B$ -Modell der Situation im  $J_1$ - $J_2$ -Modell für  $J_2 > J_1$ . Es ist also durchaus denkbar, daß auch im  $A$ - $B$ -Modell *order-from-disorder*-Effekte nachgewiesen werden können, die durch Quantenfluktuationen vermittelt werden. Auskunft darüber soll eine LSWT geben. Eher theoretischer Natur ist der HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter. Anhand seines Beispiels wird vergleichend demonstriert, wie sich die systematische Verringerung der Koordinationszahl auf die magnetische Ordnung in einem geometrisch frustrierten Quantenspinsystem auswirkt. Das Maple-Leaf-Gitter [16] ist deshalb so interessant, weil seine Koordinationszahl ( $z = 5$ ) genau zwischen der des Dreiecksgitters ( $z = 6$ ) und der des Kagomé-Gitters ( $z = 4$ ) liegt. Alle drei Spinsyste-

---

<sup>8</sup>Deutliche Probleme mit der LSWT treten z.B. dann auf, wenn man den Übergang von einem einz zu einem zweidimensionalen Spinsystem studieren will [15]. Es sei dazu auf den Anhang B verwiesen.

<sup>9</sup>Wenn er existiert, dann ist er auf jeden Fall kleiner oder gleich  $s$ .

<sup>10</sup>Die Kuprate  $Ba_2Cu_3O_4Cl_2$  und  $Sr_2Cu_3O_4Cl_2$  enthalten  $CuO$ -Ebenen, deren  $Cu$ -Atome sich zwei unterschiedlichen Untersystemen zuordnen lassen.

me sind aufgrund der geometrischen Verhältnisse frustriert. Vom HAFM auf dem Dreiecksgitter ist bekannt [17, 18, 19, 20], daß sein Grundzustand quasiklassisch geordnet ist, wohingegen der HAFM auf dem Kagomé-Gitter als Kandidat für ein ungeordnetes Quantenspinsystem gilt [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Die berechtigte Frage, ob der HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter im Grundzustand noch Fernordnung besitzt oder schon ungeordnet ist, soll im Rahmen der LSWT entschieden werden. Auf die Bedeutung der Dimensionalität eines Spinsystems für die Existenz magnetischer Ordnung ist bereits hingewiesen worden. Als Faustregel gilt in diesem Zusammenhang: Je höher die Dimension ist, desto mehr wird der Einfluß ordnungsreduzierender Fluktuationen in den Hintergrund gedrängt. Mit dem Übergang von einer zu zwei Dimensionen oder von zwei zu drei Dimensionen können sich physikalische Eigenschaften grundlegend ändern. So ist beispielsweise der Grundzustand des HAFM auf der linearen Kette nicht ferngeordnet, weil Quantenfluktuationen die klassische Néel-Ordnung vollkommen zerstören; Frustration spielt in diesem Fall keine Rolle. Ein weiteres nicht frustriertes Quantenspinsystem ist der HAFM auf dem Quadratgitter. Hierbei handelt es sich jedoch um ein zweidimensionales System, dessen Grundzustand sich durch quasiklassische Néel-Ordnung auszeichnet. Lediglich der Ordnungsparameter wird durch Quantenfluktuationen nach unten korrigiert. Noch illustrativer mit derselben Beschränkung auf den Grundzustand ist das Beispiel des  $J_1$ - $J_2$ -Modells in ein, zwei und drei Dimensionen. In einer Dimension kann es vermöge des frustrierenden  $J_2$  erst recht keine Fernordnung geben, wenn bereits die unfrustrierte Kette ungeordnet ist. Betrachtet man dasselbe Modell in zwei Dimensionen, so existiert nur noch ein Bereich<sup>11</sup> in der Umgebung von  $J_2/J_1 = 1/2$ , innerhalb dessen eine paramagnetische Grundzustandsphase vorliegt [30, 31, 32, 33]. Geht man zu drei Dimensionen über und untersucht das  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem kubisch raumzentrierten Gitter, so ergibt sich folgendes Bild: Unabhängig davon, wie stark Quantenfluktuationen und Frustration auch sind, ist dieses frustrierte Spinsystem stets ferngeordnet [34]. Welch prinzipieller Bedeutung der Dimension dabei zukommt, unterstreicht das Mermin-Wagner-Theorem [35], wonach in ein- und zweidimensionalen Spinsystemen thermische Fluktuationen für das Verschwinden langreichweiterer Ordnung sorgen. Fernordnung ist also bei endlichen Temperaturen für entsprechend dimensionierte Spinsysteme kategorisch ausgeschlossen<sup>12</sup>. Anders ausgedrückt, ist die Zwischenebenenkopplung in quasizweidimensionalen Spinsystemen eine notwendige Bedingung für die Möglichkeit magnetischer Fernordnung über den Grundzustand hinaus. Eine von Null verschiedene Zwischenebenenkopplung ist natürlich auch für den Grundzustand vor allem dann relevant, wenn z.B. die Spins in den ungekoppelten Ebenen wegen starker Frustration nur kurzreichweitig korrelieren. Das geschichtete Kagomé-Gitter, das in dieser Arbeit studiert wird, ist ein solches dreidimensionales Spinsystem. Obwohl in der Literatur der HAFM auf dem Kagomé-Gitter seit Jahren eingehend diskutiert wird, ist bisher noch nicht untersucht worden, ob sich beim Übergang in die dritte Dimension ein magnetisch geordneter Grundzustand einstellt. Mit der RGM, die Ordnung und Unordnung gleichermaßen beschreiben kann, besitzt man eine universelle Methode, die dieses Problem zu behandeln gestattet, zumal diese Theorie [28, 29] bereits erfolgreich auf den HAFM auf dem Kagomé-Gitter angewendet wurde.

---

<sup>11</sup>Es ist dies der Bereich maximaler Frustration, wenn man maximale Frustration über ein Maximum in der Grundzustandsenergie definiert.

<sup>12</sup>Das Mermin-Wagner-Theorem ist für das isotrope Heisenberg-Modell (1.1) gültig.

Folgende Gliederung liegt der vorliegenden Arbeit zugrunde: Kapitel 2 befaßt sich ausschließlich mit der LSWT. Einführend erfolgt die Ableitung der Transformationsvorschriften für Spinoperatoren nach Holstein-Primakoff. Weil die anschließend zu untersuchenden Gitter bis zu sechs Spins pro Zelle enthalten und die Diagonalisierung derartiger Hamilton-Operatoren mittels Bogoliubov-Transformation nicht mehr trivial ist, widmet sich der ganze nachfolgende Abschnitt diesem Problem. Es werden vier alternative Diagonalisierungsverfahren am Beispiel des HAFM auf dem Quadratgitter vorgestellt. In den Abschnitten 2.2 und 2.3 werden das  $A$ - $B$ - sowie das Maple-Leaf-Gitter behandelt. Die Betrachtungen werden jeweils durch die Analyse des klassischen Grundzustandes eingeleitet, worauf die entsprechende Spinwellentheorie aufbaut. Das Kapitel 3 beschäftigt sich mit der RGM. Die Herleitung der grundlegenden mathematischen Beziehungen nimmt dabei in Abschnitt 3.2 einen gesonderten Platz ein. Ergänzt wird dieser Abschnitt durch ein praktisches Beispiel, das die Anwendung der Gleichungen verdeutlichen soll. Alsdann konzentriert sich das Interesse auf das geschichtete Kagomé-Gitter und die Frage, inwieweit magnetische Ordnung in diesem Quantenspinsystem zustande kommt oder nicht. Dabei gibt es hinsichtlich der Vorzeichen der Kopplungen vier Fälle zu unterscheiden. Spinwellenrechnungen<sup>13</sup> komplettieren dabei das sich abzeichnende Bild eines auch in drei Dimensionen weitgehend ungeordneten Spinsystems. Den Schluß bildet Kapitel 4, worin die wesentlichen Resultate zusammenfassend kommentiert werden. Ergänzt und untermauert werden die Ausführungen durch einfache Beispiele, die die Stärken der jeweiligen Theorie hervorheben, die aber auch etwaige Schwächen aufzeigen. Nebenbei bemerkt, haben genau solche, einfach erscheinenden Beispiele im Laufe der Zeit auch einen wichtigen Zweck erfüllt, indem sie dem Autor halfen, sinnvolle Verallgemeinerungen zu formulieren, die die unproblematische Anwendung insbesondere der RGM auf Gitter mit Basis erlauben<sup>14</sup>.

---

<sup>13</sup>Solange die Spinwellenanregungen  $\omega_{m\mathbf{q}}$  nicht komplex werden, lassen sich immer Energien ausrechnen. Insbesondere auch dann, wenn die zur Berechnung von Ordnungsparametern oder Korrelationsfunktionen benötigten Integrale divergieren. Solche Divergenzen sind zumeist ein Hinweis darauf, daß die Annahme eines quasiklassisch geordneten Grundzustandes falsch ist; daß also das Spinsystem ungeordnet ist.

<sup>14</sup>Das simple Grundprinzip bestand darin, sich das Einfache klar zu machen, um sich danach an das Schwierige zu wagen. So wird die RGM für das Heisenberg-Modell auf dem Quadrat-Gitter in der Literatur ausführlich behandelt. Dort basiert die Theorie auf einem Gitter, in dessen Zellen sich nur ein Spin befindet, was aus Gründen, die in dieser Arbeit dargelegt werden, legitim ist. Die Fragestellung, die sich dann für den Autor ergab und die es zu beantworten galt, war die folgende: Wie lassen sich die entsprechenden Resultate aus der Literatur reproduzieren, wenn man Zellen benutzt, die statt einem zwei Spins enthalten? Die Antwort auf diese Frage ließ dann gewisse, verallgemeinerungswürdige Schlüsse zu.

# Kapitel 2

## Die lineare Spinwellentheorie

### 2.1 Allgemeine Betrachtungen

Die Spinwellentheorie basiert auf dem klassischen Grundzustand eines Spinsystems und ist nur für tiefste Temperaturen gültig. Sie geht davon aus, daß trotz vorhandener Quantenfluktuationen die klassische Ordnung im Spinsystem weitgehend erhalten bleibt. Zur Spinwellentheorie gelangt man durch eine Transformation des Hamilton-Operators. Die Transformation beruht auf dem Formalismus der zweiten Quantisierung, indem Spinoperatoren bosonisiert werden und die Spinalggebra durch die einfache Algebra der Bose-Operatoren ersetzt wird. Mathematisch ist diese Transformation als eine Entwicklung um den klassischen Grundzustand nach dem Parameter  $1/s$  - der inversen Spinquantenzahl - aufzufassen. Mit verlässlichen Aussagen ist genau dann zu rechnen, wenn der tatsächliche Quantenzustand magnetische Ordnung besitzt. Andernfalls liefert die Spinwellentheorie zumindest qualitative Anhaltspunkte dafür, daß Quantenfluktuationen bereits jegliche klassische Ordnung zerstört haben. Den Übergang zu einem bosonischen Hamilton-Operator leistet auf der einen Seite die Dyson-Maleev-Transformation [36], auf die aber nicht näher eingegangen werden soll. Alternativ bietet sich ein weiteres Verfahren der Bosonisierung an - und zwar die Holstein-Primakoff-Transformation [37]. Letztere findet in ihrer linearisierten Form im Rahmen dieser Arbeit Verwendung<sup>1</sup>. Nach der linearen Holstein-Primakoff-Transformation erhält man einen Hamilton-Operator, der quadratisch in Bose-Operatoren ist. Ein solcher Hamilton-Operator, der natürlich nur eine Näherung darstellt, ist exakt behandelbar. Ziel ist es jetzt, diesen neuen Hamilton-Operator zu diagonalisieren. Dies geschieht durch eine Bogoliubov-Transformation. Obwohl die Bogoliubov-Transformation zu den Standardprozeduren in der Spinwellentheorie zählt [38], kann sich die konkrete Rechnung bei komplizierten Gittern mit Basis als schwierig erweisen. In dieser Arbeit werden Gitter mit bis zu sechs Spins pro Elementarzelle behandelt. Es ist daher sinnvoll, dieser Problematik einen eigenen Abschnitt zu widmen. In ihm sollen vier alternative

---

<sup>1</sup>In einer linearen Theorie wird das Spinsystem auf ein System wechselwirkungsfreier harmonischer Oszillatoren abgebildet, wobei die Elementaranregungen als Magnonen bezeichnet werden. Mit zunehmender Temperatur verliert jedoch das Bild eines idealen "Magnonengases" seine Gültigkeit, weil Wechselwirkungen zwischen den Magnonen nicht mehr vernachlässigt werden können. Dagegen wachsen innerhalb der linearen Theorie die Zahl der angeregten Magnonen - der Bose-Statistik gehorrend - und damit verbunden die Quantenkorrekturen über alle Maßen.

Diagonalisierungsverfahren vorgestellt werden.

### 2.1.1 Die Holstein-Primakoff-Transformation

Um sich die Herleitung der Transformationsvorschriften klarzumachen, sei zur Illustration ein Spin der Länge  $s$  betrachtet. Üblicherweise wird entlang der  $z$ -Achse quantisiert. Der Operator  $S^z$  kann die Eigenwerte  $m = -s, -s+1, \dots, s$  annehmen. Greift man sich nun einen dieser Eigenzustände  $|m\rangle$  heraus, so läßt sich die Eigenwertgleichung  $S^z|m\rangle = m|m\rangle$  umformulieren in

$$S^z|m\rangle = (s-n)|m\rangle, \quad (2.1)$$

wobei  $m = s-n$  gilt und  $n$  die Abweichung vom maximal möglichen Eigenwert  $s$  angibt. Mit  $n = 0, 1, \dots, 2s$  werden alle Eigenwerte von  $S^z$  erreicht. Diese Betrachtungsweise legt den Schluß nahe, den Operator  $S^z$  wie folgt zu transformieren:

$$S^z = s - a^+a \quad \text{mit} \quad [a, a^+]_- = 1. \quad (2.2)$$

Dabei sind  $a^+$  sowie  $a$  Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren von Teilchen, die der Bose-Einstein-Statistik gehorchen und als Magnonen bezeichnet werden, so daß  $n = s-m$  als Zahl der angeregten Magnonen zu interpretieren ist. Eine Problematik dieser Transformation offenbart sich in der Tatsache, daß  $n$  als Eigenwert des Magnonenanzahloperators  $a^+a$  mit Null beginnend beliebig groß werden kann, aber wegen  $|m| \leq s$  beschränkt bleiben soll. Aus diesem Grunde kann sich der Anwendungsbereich der Theorie nur auf den Grundzustand oder vergleichsweise tiefe Temperaturen erstrecken.

Wie werden nun die übrigen Komponenten des Spinoperators in die bosonische Form überführt? Dazu wird die Wirkung des Operators  $S^+$  auf  $|m\rangle$  näher untersucht. Es gilt

$$S^+|m\rangle = \sqrt{(s+1+m)(s-m)}|m+1\rangle. \quad (2.3)$$

Unter Verwendung von  $n$  kann obige Beziehung umformuliert werden. Man findet

$$\begin{aligned} S^+|s-n\rangle &= \sqrt{(2s-(n-1))n}|s-(n-1)\rangle \quad \text{bzw.} \\ S^+|n\rangle &= \sqrt{(2s-(n-1))n}|n-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Ersetzen von  $S^+$  durch den neuen Operator  $\sqrt{(2s-a^+a)a}$  liefert wegen

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad \text{sowie} \quad a^+a|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.5)$$

das identische Resultat. Damit ist die Holstein-Primakoff-Transformation gefunden. Es gilt

$$S^z = s - a^+a, \quad S^+ = \sqrt{(2s-a^+a)a}, \quad S^- = a^+\sqrt{(2s-a^+a)}. \quad (2.6)$$

In dieser Arbeit soll die linearisierte Variante der soeben begründeten Holstein-Primakoff-Transformation Verwendung finden. Danach werden die transformierten Spinoperatoren als operatorwertige Funktionen bezüglich des Parameters  $1/s$  entwickelt. In linearer Näherung wird die Wurzel entsprechend

$$\sqrt{2s-a^+a} = \sqrt{2s}\sqrt{1-\frac{a^+a}{2s}} \approx \sqrt{2s} \quad (2.7)$$

ersetzt. Legitim im streng mathematischen Sinn ist dieses Vorgehen eigentlich nur für große  $s$ , also im klassischen Grenzfall  $s \rightarrow \infty$ . Diese Linearisierung ist aber auch dann gerechtfertigt, wenn die Zahl der angeregten Magnonen, die durch den Operator  $a^\dagger a$  ausgedrückt wird, gering bleibt, was insbesondere dann der Fall ist, wenn es sich um tiefste Temperaturen einschließlich des Grundzustandes handelt und sich das Spinsystem trotz seiner Quantennatur nahezu wie sein klassisches Pendant verhält. Wie rechnet man konkret? Praktisch bestimmt man zunächst den klassischen Grundzustand des Spinsystems. Der Einfachheit halber entspreche dieser einer planaren Spinkonfiguration. Alle Spinvektoren liegen somit in einer Ebene. Es sei dies die  $x$ - $z$ -Ebene im

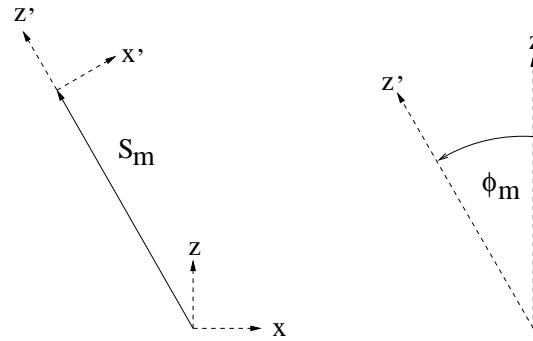


Abbildung 2.1: Zur Illustration von (2.8). Zu unterscheiden ist das globale Koordinatensystem (ungestrichen) vom lokalen Koordinatensystem (gestrichen).

Spinraum. In dieser Ebene wird ein globales Koordinatensystem festgelegt, bezüglich dessen ein Spin  $\mathbf{S}_m$  am Ort  $\mathbf{r}_m$  die Komponenten  $(S_m^x, 0, S_m^z)$  besitzt. In einem lokalen Koordinatensystem zeige derselbe Spin in die lokale  $z'$ -Richtung. Die lokalen Komponenten lauten deshalb  $(0, 0, s)$ . In Abb. 2.1 ist diese Situation dargestellt. Zwischen den Komponenten in beiden Koordinatensystemen besteht der Zusammenhang

$$\begin{pmatrix} S_m^x \\ 0 \\ S_m^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi_m & 0 & -\sin \phi_m \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \phi_m & 0 & \cos \phi_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ s \end{pmatrix}$$

bzw.

$$\mathbf{S}_m = \begin{pmatrix} \cos \phi_m & 0 & -\sin \phi_m \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \phi_m & 0 & \cos \phi_m \end{pmatrix} \mathbf{S}'_m. \quad (2.8)$$

Die zuvor abgeleitete Holstein-Primakoff-Transformation ist nunmehr sofort anwendbar. Zur Quantisierung dienen die lokalen  $z'$ -Achsen der einzelnen Spins, wozu die gestrichenen Komponenten gemäß (2.6) bzw. (2.7) in die Operatorform gebracht werden. Doch zunächst hat das Skalarprodukt  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n$  die Gestalt

$$(S'_m^x \ S'_m^y \ S'_m^z) \begin{pmatrix} \cos \phi_m & 0 & -\sin \phi_m \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi_m & 0 & \cos \phi_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi_n & 0 & -\sin \phi_n \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \phi_n & 0 & \cos \phi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S'_n^x \\ S'_n^y \\ S'_n^z \end{pmatrix},$$

woraus

$$(S'_m^x \ S'_m^y \ S'_m^z) \begin{pmatrix} \cos(\phi_m - \phi_n) & 0 & \sin(\phi_m - \phi_n) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\phi_m - \phi_n) & 0 & \cos(\phi_m - \phi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S'_n^x \\ S'_n^y \\ S'_n^z \end{pmatrix}$$

folgt. Ausmultiplizieren der letzten Beziehung liefert

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n &= \cos(\phi_m - \phi_n) (S'_m S'_n + S'_m S'_n) + S'_m S'_n \\ &\quad - \sin(\phi_m - \phi_n) (S'_m S'_n - S'_m S'_n).\end{aligned}$$

Die eigentliche Transformation erfolgt nun. Es gilt  $S'^z = s - a^+ a$ ,  $S'^x = \sqrt{2s} (a + a^+)/2$  sowie  $S'^y = \sqrt{2s} (a - a^+)/2i$ . Versehen mit den entsprechenden Indizes ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n &= \cos(\phi_m - \phi_n) s^2 - \cos(\phi_m - \phi_n) s (a_m^+ a_m + a_n^+ a_n) \\ &\quad + \frac{\cos(\phi_m - \phi_n) - 1}{2} s (a_m^+ a_n^+ + a_m a_n) \\ &\quad + \frac{\cos(\phi_m - \phi_n) + 1}{2} s (a_m^+ a_n + a_m a_n^+) \\ &\quad - \frac{\sqrt{2s}}{2} \sin(\phi_m - \phi_n) ((s - a_m^+ a_m) (a_n + a_n^+) - (a_m + a_m^+) (s - a_n^+ a_n)) \\ &\quad + \cos(\phi_m - \phi_n) a_m^+ a_m a_n^+ a_n.\end{aligned}$$

In linearer Spinwellennäherung erfolgt die Darstellung des Skalarproduktes durch quadratische Terme in Bose-Operatoren. Beim Multiplizieren entstehen Terme dritter und vierter Ordnung. Sie repräsentieren jedoch Wechselwirkungen zwischen Magnonen, die im Rahmen einer linearen Theorie per definitionem vernachlässigt werden sollen, da sie dem Bild wechselwirkungsfreier Magnonen widersprechen. Die lineare Anteile heben sich beim Aufstellen des bosonisierten Hamilton-Operators durch das Aufsummieren aller Skalarprodukte heraus. Dies gilt zumindest in allen bisher untersuchten Fällen auch dann, wenn verkantete Strukturen vorliegen und  $\sin(\phi_m - \phi_n)$  nicht verschwindet. Letztendlich würden die linearen Terme im thermodynamischen Limes auch nur mit  $\sqrt{N}$  skalieren [40] und könnten allein deshalb schon unberücksichtigt bleiben<sup>2</sup>. Läßt sich ein Problem - wie das des Dreiecksgitters [19] - unter Verwendung von nur einer Magnonensorte formulieren, so kompensieren sich diese Beiträge nicht erst in der Summe, sondern bereits in  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n$ . Endgültig lautet die Operatorform des Skalarproduktes

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n &= \cos(\phi_m - \phi_n) s^2 - \cos(\phi_m - \phi_n) s (a_m^+ a_m + a_n^+ a_n) \\ &\quad + \frac{\cos(\phi_m - \phi_n) - 1}{2} s (a_m^+ a_n^+ + a_m a_n) \\ &\quad + \frac{\cos(\phi_m - \phi_n) + 1}{2} s (a_m^+ a_n + a_m a_n^+).\end{aligned}\tag{2.9}$$

Der Term  $\cos(\phi_m - \phi_n) s^2$  liefert den klassischen Anteil zur Energie. Er ist im Gegensatz zu den übrigen Beiträgen von der Ordnung  $s^2$ , so daß er den Übergang zum klassischen Spinsystem "überlebt". Kennzeichnet den klassischen Grundzustand eine nonplanare Spinstruktur, so gilt (2.9) ebenfalls, nur daß  $\cos(\phi_m - \phi_n)$  als Richtungskosinus des betreffenden Spinpaars zu interpretieren ist<sup>3</sup>. Ein derartig vereinfachter

---

<sup>2</sup> $N$  ist die Zahl der Gitterzellen/Spins. Die in der LSWT relevanten Terme sind zu  $N$  proportional.

<sup>3</sup>Die Herleitung, die auf (2.9) führt, ist dann auch gültig, weil zwei Spins - es geht ja nur um die Transformation eines Skalarproduktes zweier Spins - immer eine Ebene definieren, innerhalb der die Transformation vollzogen wird. Andernfalls bliebe unklar, wie sich der klassische Anteil zur Energie reproduzieren ließe.

Hamilton-Operator ist im Prinzip leicht mit Standardmethoden diagonalisierbar, denn als quadratische Form in Bose-Operatoren existiert unter bestimmten Voraussetzungen<sup>4</sup> eine Bogoliubov-Transformation, die ihn in eine Summe entkoppelter, harmonischer Oszillatoren umzuwandeln vermag. Doch zuvor ist der Hamilton-Operator mittels einer Fourier-Transformation in den  $\mathbf{q}$ -Raum zu überführen. Was bleibt, ist die Frage, welches Gitter dieser Transformation zugrunde gelegt werden muß. Um begriffliche Unklarheiten zu vermeiden, sollen zunächst zwei in Frage kommende Gittertypen unterschieden werden. Da ist zum einen das Gitter, das durch den Hamilton-Operator dem Kristallgitter aufgeprägt wird<sup>5</sup>. In ihm spielen nur diejenigen Atome eine Rolle, die einen Spin besitzen und die mit anderen Atomen über ihre Spins wechselwirken. Dieses Gitter sei als Spingitter bzw. geometrisches Gitter bezeichnet. Seine Elementarzelle ist so bemessen, daß durch einfaches Aneinanderfügen der Zellen das gesamte Spingitter einschließlich aller Kopplungen erzeugt werden kann. Entsprechend soll unter dem magnetischen Gitter dasjenige verstanden werden, welches man findet, wenn man den klassischen Grundzustand des betrachteten Spinsystems bestimmt. Die Elementarzelle des letzteren ist im allgemeinen größer als die geometrische Elementarzelle und reproduziert durch Translation sowohl das geometrische Gitter als auch die klassische Spinkonfiguration. Auf diese Weise ist die Frage, welches Gitter einer Fourier-Transformation zu unterziehen ist, beantwortet. Da die gesamte Theorie vom klassischen Grundzustand ausgeht und der bosonische Hamilton-Operator dessen Eigenschaften enthalten soll, fällt die Wahl auf das magnetische Gitter. Spins innerhalb einer Elementarzelle sind als einander nicht äquivalent zu betrachten, selbst dann nicht, wenn sie zum gleichen magnetischen Untergitter gehören, also klassisch dieselbe Orientierung aufweisen. Mathematisch trägt man dem dadurch Rechnung, daß jedem Spin innerhalb der Elementarzelle eine eigene Magnonen sorte zugeordnet wird. Zur Unterscheidung dienen zusätzliche Indizes. In einigen Fällen genügt es aber, statt der magnetischen die geometrische Elementarzelle zum Ausgangspunkt der Rechnungen zu machen. Dies ist dann der Fall, wenn es, vom geometrischen Gitter ausgehend, einen reziproken Gittervektor  $\mathbf{Q}$  gibt, der die magnetische Ordnung beschreibt. Anhand eines kleinen Beispiels soll kurz erläutert werden, was damit gemeint ist. Gegeben sei der einfache HAFM auf dem Quadratgitter mit Wechselwirkungen ausschließlich zwischen nächstbenachbarten Spins der Länge  $s$ . Sein klassischer Grundzustand ist der Néel-Zustand mit paarweise antiparallel ausgerichteten Nachbarspins. Die magnetische Elementarzelle ist doppelt so groß wie die geometrische und enthält zwei Spins. Hier läßt sich ein magnetischer Ordnungsvektor finden. Unter Berücksichtigung von zwei unabhängigen Translationsrichtungen ist er durch  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  gegeben, denn betrachtet man zwei geometrische Elementarzellen, die durch den Gittervektor  $\mathbf{R}$  miteinander verbunden sind, so stellt man fest, daß die jeweiligen Spins um den Winkel  $\mathbf{QR}$  gegeneinander verdreht sind<sup>6</sup>. Mit der möglichen Beschränkung auf die geometrische Elementarzelle bietet sich der

---

<sup>4</sup>Es sind bosonische Hamilton-Operatoren denkbar, bei denen die weiter unten erläuterten Diagonalsierungsprozeduren z.B. auf komplexe Anregungen führen.

<sup>5</sup>Das Kristallgitter beinhaltet nichtmagnetische Atome. Der Hamilton-Operator (1.1) selektiert die magnetisch wechselwirkenden Atome mit ihren Spins.

<sup>6</sup>Bei einem nonplanaren Grundzustand ist die Definition eines Ordnungsvektors  $\mathbf{Q}$  nicht trivial. Doch auch dann ist eine Reduktion auf das geometrische Gitter möglich, wenn die Winkelverhältnisse den Richtungskosinus betreffend von Zelle zu Zelle gleich bleiben. Ein konkretes Beispiel hierzu wäre die Phase II des  $A$ - $B$ -Modells aus Abschnitt 2.2.1. Hier würde eine Drei-Magnonen-Theorie genügen, obwohl die magnetische Elementarzelle zwölf Spins besitzt.

Vorteil einer äquivalenten Behandlung des Problems mit geringerem Aufwand, was besonders bei Gittern mit Basis ins Gewicht fällt. Hintergrund dieser Betrachtungen ist die Überlegung, daß die magnetische Elementarzelle in den Fällen, wo sie nicht mit der geometrischen Elementarzelle zusammenfällt, mehr Spins als die geometrische Elementarzelle enthält. Zwischen den Spinwellendispersionen im geometrischen Gitter und denjenigen im magnetischen Gitter besteht ein einfacher Zusammenhang. Beim Übergang vom geometrischen zum magnetischen Gitter verkleinert sich die dazugehörige Brillouin-Zone, wobei die magnetische Brillouin-Zone innerhalb der geometrischen Brillouin-Zone liegt. Dann gehen die Spinwellendispersionen im magnetischen Gitter aus den Spinwellendispersionen im geometrischen Gitter hervor, indem man letztere an den neuen Zonengrenzen reflektiert.

### 2.1.2 Die Bogoliubov-Transformation

Auf die Fourier-Transformation folgt die Diagonalisierung des Hamilton-Operators. Welche praktischen Möglichkeiten diesbezüglich bestehen, soll in diesem Abschnitt am Beispiel des bereits eingeführten HAFM auf dem Quadratgitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung illustriert werden.

Wie bereits erwähnt wurde, ist der klassische Grundzustand des HAFM auf dem Quadratgitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung bei beliebigem  $s$  der Néel-Zustand. Wegen der Existenz des magnetischen Ordnungsvektors  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , der diesen Zustand beschreibt, kann das geometrische Gitter mit den Basisvektoren  $\mathbf{r}_1 = (1, 0)$  und  $\mathbf{r}_2 = (0, 1)$  als Ausgangspunkt der Rechnung dienen. Die geometrische Elementarzelle enthält einen Spin, so daß nur eine Magnonensorte eingeführt zu werden braucht. Es handelt sich somit um eine Ein-Magnonen-Theorie. Weiterhin sei die Zahl der Spins durch  $N$  gegeben, welche dann mit der Zahl der Gitterplätze identisch ist. Der Hamilton-Operator ist in diesem Fall

$$H = \frac{J}{2} \sum_{m,\delta} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\delta}, \quad (2.10)$$

wobei die Summe über alle Gitterplätze  $\mathbf{R}_m$  mit  $m = 1, \dots, N$  und alle nächsten Nachbarn  $\delta = 1, \dots, 4$  läuft. Die Zahl der Bindungen ist  $2N$ , womit für die klassische Grundzustandsenergie  $-2NJs^2$  folgt. Unter Verwendung der Transformationsvorschrift (2.9) mit  $\cos(\phi_m - \phi_{m+\delta}) = -1$  gelangt man zu

$$H = \frac{J}{2} \sum_{m,\delta} -s^2 + s (a_{1,m}^+ a_{1,m} + a_{1,m+\delta}^+ a_{1,m+\delta}) - s (a_{1,m}^+ a_{1,m+\delta}^+ + a_{1,m} a_{1,m+\delta}). \quad (2.11)$$

Den Bose-Operatoren sind zwei Indizes zugeordnet. Der erste Index charakterisiert die Magnonensorte, und der zweite Index kennzeichnet den Gitterplatz. Nach der Fourier-Transformation

$$a_{1,m} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_m) \quad (2.12)$$

ergibt sich der zu diagonalisierende Hamilton-Operator

$$H = -2NJs^2 + \sum_{\mathbf{q}} 4Jsa_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} - 2Js\gamma_{\mathbf{q}} (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}) \quad (2.13)$$

mit  $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$ . Die Aufgabe besteht nun darin, einen Operator dieses Typs vermittels einer Bogoliubov-Transformation zu diagonalisieren. In ihrer allgemeinsten Form lautet die Bogoliubov-Transformation

$$a_{n\mathbf{q}} = \sum_m u_{nm\mathbf{q}} \alpha_{m\mathbf{q}} + v_{nm-\mathbf{q}}^* \alpha_{m-\mathbf{q}}^+. \quad (2.14)$$

Die Indizes  $m, n$  in der letzten Gleichung erstrecken sich über alle Magnonenarten. Unter der Nebenbedingung, daß die neuen Operatoren  $\alpha_{m\mathbf{q}}$  ebenfalls vom Bose-Typ sind, soll die Transformation einen Hamilton-Operator der Form (2.13) in

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \sum_m \omega_{m\mathbf{q}} \alpha_{m\mathbf{q}}^+ \alpha_{m\mathbf{q}} \quad (2.15)$$

überführen. Gesucht sind also die Anregungen  $\omega_{m\mathbf{q}}$  sowie insbesondere die Transformationskoeffizienten  $u_{nm\mathbf{q}}$  und  $v_{nm-\mathbf{q}}^*$ , die abzusichern haben, daß die Bose-Vertauschungen ebenfalls für die neuen Operatoren  $\alpha_{m\mathbf{q}}$  erfüllt sind. Der Ansatz für die Bogoliubov-Transformation im konkret vorliegenden Fall ist dann

$$a_{1\mathbf{q}} = u_{11\mathbf{q}} \alpha_{1\mathbf{q}} + v_{11-\mathbf{q}}^* \alpha_{1-\mathbf{q}}^+. \quad (2.16)$$

Es zeigt sich später, daß für die Koeffizienten die Relationen

$$u_{11-\mathbf{q}}^* = u_{11\mathbf{q}} \quad \text{sowie} \quad v_{11-\mathbf{q}}^* = v_{11\mathbf{q}} \quad (2.17)$$

gelten, womit sich (2.16) zu

$$a_{1\mathbf{q}} = u_{11\mathbf{q}} \alpha_{1\mathbf{q}} + v_{11\mathbf{q}} \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \quad (2.18)$$

vereinfacht. Die Gültigkeit der Bose-Vertauschungen ist genau dann erhalten, wenn, in kompakter Matrixschreibweise formuliert, die Beziehung

$$\begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}} & v_{11\mathbf{q}} \\ v_{11\mathbf{q}} & u_{11\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}}^* & -v_{11\mathbf{q}}^* \\ -v_{11\mathbf{q}}^* & u_{11\mathbf{q}}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

gilt. Bleibt man weiterhin der Matrixform treu, so läßt sich die Bogoliubov-Transformation auch wie folgt aufschreiben:

$$\begin{pmatrix} a_{1\mathbf{q}} \\ a_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}} & v_{11\mathbf{q}} \\ v_{11\mathbf{q}} & u_{11\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1\mathbf{q}} \\ \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

bzw. wegen (2.19) die inverse Transformation

$$\begin{pmatrix} \alpha_{1\mathbf{q}} \\ \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}}^* & -v_{11\mathbf{q}}^* \\ -v_{11\mathbf{q}}^* & u_{11\mathbf{q}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1\mathbf{q}} \\ a_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Im Anschluß erfolgt die Darstellung verschiedener Lösungsstrategien.

**Explizite Methode:** Diese Vorgehensweise liegt auf der Hand. Einfaches Einsetzen von (2.18) in (2.13) unter Berücksichtigung von (2.19) zusammen mit der

Forderung, daß Nichtdiagonalterme zu verschwinden haben, liefert ein nichtlineares Gleichungssystem, dessen Lösung das allseits bekannte Resultat

$$\begin{aligned} u_{11\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}}^* &= 1/2 + 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}}, \quad v_{11\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}}^* = -1/2 + 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}} \\ \text{mit } \omega_{1\mathbf{q}} &= 4J_s \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2} = \omega_{1-\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

ist. Im Grundzustand ist der für die Bestimmung der Magnetisierung relevante Erwartungswert  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle$  gegeben durch  $-1/2 + 1/2 \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2}$ . So naheliegend diese Methode auch ist, sie erweist sich als nicht praktikabel, sobald kompliziertere Hamilton-Operatoren mit mehreren Magnonensorten für nicht rein Néel-artige Spinstrukturen untersucht werden sollen.

**Eigenwertproblem:** Einer weiteren Methode gelingt es, das Problem des Auffindens der Bogoliubov-Transformation als Eigenwertgleichung zu formulieren. Die Eigenwerte einer Matrix, die sich aus der Vertauschung der untransformierten Bose-Operatoren mit dem untransformierten Hamilton-Operator ergibt, stellen die Anregungen dar. Die Komponenten der dazugehörigen Eigenvektoren entsprechen den gesuchten Transformationskoeffizienten. Konkret berechnet man zunächst die Vertauschungen der Operatoren  $a_{1\mathbf{q}}$  und  $a_{1-\mathbf{q}}^+$  mit dem Hamilton-Operator (2.13). Das Ergebnis hat in kompakter Matrixform die Gestalt

$$\begin{pmatrix} [a_{1\mathbf{q}}, H]_- \\ [a_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4J_s & -4J_s \gamma_{\mathbf{q}} \\ 4J_s \gamma_{\mathbf{q}} & -4J_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1\mathbf{q}} \\ a_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

bzw. durch (2.20)

$$\begin{pmatrix} [a_{1\mathbf{q}}, H]_- \\ [a_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4J_s & -4J_s \gamma_{\mathbf{q}} \\ 4J_s \gamma_{\mathbf{q}} & -4J_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}} & v_{11\mathbf{q}} \\ v_{11\mathbf{q}} & u_{11\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1\mathbf{q}} \\ \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Andererseits gilt weiterhin

$$\begin{pmatrix} [a_{1\mathbf{q}}, H]_- \\ [a_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11\mathbf{q}} & v_{11\mathbf{q}} \\ v_{11\mathbf{q}} & u_{11\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [\alpha_{1\mathbf{q}}, H]_- \\ [\alpha_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Unter der Voraussetzung, daß eine Diagonalform von (2.13) existiert, können die Vertauschungen auf der rechten Seite von (2.25) leicht bestimmt werden. Man findet wegen der Symmetrie der Eigenwerte bezüglich der Inversion im  $\mathbf{q}$ -Raum, d.h.  $\omega_{1\mathbf{q}} = \omega_{1-\mathbf{q}}$ ,

$$\begin{aligned} [\alpha_{1\mathbf{q}}, H]_- &= \sum_{\mathbf{q}'} \omega_{1\mathbf{q}'} \underbrace{[\alpha_{1\mathbf{q}}, \alpha_{1\mathbf{q}'}^+]_-}_{\delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}} \alpha_{1\mathbf{q}'} = \omega_{1\mathbf{q}} \alpha_{1\mathbf{q}} \quad \text{sowie} \\ [\alpha_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- &= \sum_{\mathbf{q}'} \omega_{1\mathbf{q}'} \alpha_{1\mathbf{q}'}^+ \underbrace{[\alpha_{1-\mathbf{q}}^+, \alpha_{1\mathbf{q}'}]_-}_{-\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'}} \alpha_{1\mathbf{q}'} = -\omega_{1\mathbf{q}} \alpha_{1-\mathbf{q}}^+. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Damit wird (2.25)

$$\begin{pmatrix} [a_{1\mathbf{q}}, H]_- \\ [a_{1-\mathbf{q}}^+, H]_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_{1\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}} & -\omega_{1\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}} \\ \omega_{1\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}} & -\omega_{1\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1\mathbf{q}} \\ \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Nach Gleichsetzen von (2.24) mit (2.27) ergibt sich die erwünschte Eigenwertgleichung:

$$\begin{pmatrix} 4Js & -4Js\gamma_q \\ 4Js\gamma_q & -4Js \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11q} & v_{11q} \\ v_{11q} & u_{11q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_{1q}u_{11q} & -\omega_{1q}v_{11q} \\ \omega_{1q}v_{11q} & -\omega_{1q}u_{11q} \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Wenn eine Diagonalform von (2.13) existiert, dann sollte die Matrix, deren Eigenwertproblem zu lösen ist<sup>7</sup>, zwei Eigenwerte besitzen, die sich nur durch das Vorzeichen unterscheiden. Dies korrespondiert mit dem Auftreten von zwei Polen in den Greenschen Funktionen, die in diesem Abschnitt weiter hinten zur Diagonalisierung herangezogen werden. Andererseits sind die Eigenvektoren nicht eindeutig bestimmt, d.h. nicht jeder Eigenvektor liefert automatisch die richtigen Transformationskoeffizienten. Erst die korrekte Normierung gewährleistet, daß die Bose-Vertauschungen nicht verletzt werden.

Als Eigenwerte  $\pm\omega_{1q}$  ergeben sich erwartungsgemäß  $\pm 4Js\sqrt{1-\gamma_q^2}$  mit den dazugehörigen Eigenvektoren zunächst in allgemeiner Form:

$$+\omega_{1q} \rightarrow t_q^+ \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \end{pmatrix}, \quad -\omega_{1q} \rightarrow t_q^- \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{4Js+\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

woraus für die Transformationsmatrix der Ansatz

$$\begin{pmatrix} u_{11q} & v_{11q} \\ v_{11q} & u_{11q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_q^+ & t_q^- \\ t_q^+ \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} & t_q^- \frac{4Js+\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

folgt. Da jeweils Diagonal- sowie Nebendiagonalelemente gleich sein sollen, muß das homogene Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{4Js+\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \\ -\frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_q^+ \\ t_q^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

nichttriviale Lösungen besitzen. Tatsächlich verschwindet die Determinante, so daß der Ansatz nunmehr lauten kann

$$\begin{pmatrix} u_{11q} & v_{11q} \\ v_{11q} & u_{11q} \end{pmatrix} = t_q \begin{pmatrix} 1 & \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \\ \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Als einziger noch offener Parameter ist  $t_q$  so zu wählen, daß die Bose-Vertauschungen gelten, die sich in Gleichung (2.19) manifestieren. Daher ist

$$\begin{pmatrix} u_{11q}^* & -v_{11q}^* \\ -v_{11q}^* & u_{11q}^* \end{pmatrix} = \frac{1}{t_q} \begin{pmatrix} 1 & \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \\ \frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} & 1 \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.33)$$

zu fordern. Das Ergebnis der Invertierung

$$\frac{4Js + \omega_{1q}}{2\omega_{1q}t_q} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} \\ -\frac{4Js-\omega_{1q}}{4Js\gamma_q} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

---

<sup>7</sup>Man beachte, daß der Hamilton-Operator zwar hermitesch ist, aber dies für die Matrix selbst nicht gelten muß.

ist nun (2.32) gegenüberzustellen. Simultan wird dieses Gleichungssystem durch

$$t_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^* = \frac{1}{2} + \frac{2J_s}{\omega_{1\mathbf{q}}} \quad (2.35)$$

befriedigt. In Übereinstimmung mit den zuvor abgeleiteten Beziehungen wird (2.13) bis auf eine unbedeutende Phase durch

$$\begin{pmatrix} a_{1\mathbf{q}} \\ a_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \sqrt{1/2 + 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}}} & \sqrt{1/2 - 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}}} \\ \sqrt{1/2 - 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}}} & \sqrt{1/2 + 2J_s/\omega_{1\mathbf{q}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{1\mathbf{q}} \\ \alpha_{1-\mathbf{q}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

in Diagonalform gebracht. Daran anschließend, erfolgen nun einige allgemeine Bemerkungen zur Symmetrie der Eigenlösungen bezüglich der Inversion  $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ . Es geht um den Nachweis der Gültigkeit von (2.17). Zunächst kann wiederum aufgrund der Inversionssymmetrie des Gitters im  $\mathbf{q}$ -Raum davon ausgegangen werden, daß  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{-\mathbf{q}}$  gilt<sup>8</sup>. Die entsprechenden Eigenwertgleichungen seien als gelöst zu betrachten:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{q}} |\omega_{\mathbf{q}}\rangle &= \omega_{\mathbf{q}} |\omega_{\mathbf{q}}\rangle , & \Omega_{-\mathbf{q}} |\omega_{-\mathbf{q}}\rangle &= \omega_{\mathbf{q}} |\omega_{-\mathbf{q}}\rangle , \\ \Omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{\mathbf{q}}\rangle &= -\omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{\mathbf{q}}\rangle , & \Omega_{-\mathbf{q}} |-\omega_{-\mathbf{q}}\rangle &= -\omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{-\mathbf{q}}\rangle . \end{aligned}$$

Dabei ist  $\Omega_{\mathbf{q}}$  diejenige Matrix, die man durch Kommutieren des Hamilton-Operators mit den untransformierten Bose-Operatoren erhält und deren Eigenwerte den Spinwellendispersionen  $\omega_{\mathbf{q}}$  entsprechen. Unter den  $|\omega_{\mathbf{q}}\rangle$  sind die dazugehörigen Eigenvektoren zu verstehen, deren Komponenten die Bogoliubov-Koeffizienten darstellen. Wegen  $i\mathbf{q} = (-i\mathbf{q})^*$  ist leicht einzusehen, daß  $\Omega_{\mathbf{q}} = \Omega_{-\mathbf{q}}^*$  immer erfüllt ist. Konjugieren liefert

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{q}} |\omega_{\mathbf{q}}\rangle &= \omega_{\mathbf{q}} |\omega_{\mathbf{q}}\rangle , & \Omega_{\mathbf{q}} |\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^* &= \omega_{\mathbf{q}} |\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^* , \\ \Omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{\mathbf{q}}\rangle &= -\omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{\mathbf{q}}\rangle , & \Omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^* &= -\omega_{\mathbf{q}} |-\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^* , \end{aligned}$$

woraus  $|\omega_{\mathbf{q}}\rangle = |\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^*$  sowie  $|-\omega_{\mathbf{q}}\rangle = |-\omega_{-\mathbf{q}}\rangle^*$  folgt.

**Greensche Funktionen:** Auf einem eleganteren Wege können die Bogoliubov-Koeffizienten auch unter Zuhilfenahme geeignet zu wählender Greenscher Funktionen berechnet werden. Greensche Funktionen spielen im weiteren Verlauf dieser Arbeit noch eine bedeutende Rolle. Deshalb soll die Darstellung dieser Methode mit besonderer Sorgfalt erfolgen. Grundlage ist die allgemeine Bewegungsgleichung Greenscher Funktionen:

$$\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega} = \left\langle [A, B]_{\eta=\pm 1} \right\rangle + \langle\langle [A, H]_-; B \rangle\rangle_{\omega}. \quad (2.37)$$

$A$  und  $B$  sind beliebige Operatoren,  $[A, B]_{\eta} = AB - \eta BA$  ist für  $\eta = +1$  der Kommutator und für  $\eta = -1$  der Antikommutator beider Operatoren. Mit welchem  $\eta$  gerechnet wird, ist ohne Bedeutung und kann dem Problem angepaßt gewählt werden. Hier erweist es sich als günstig, wegen der bosonischen Natur der beteiligten Operatoren die Kommutatorvariante zu verwenden.

Durch das Linearisieren enthält der Hamilton-Operator bekanntlich nur quadratische

---

<sup>8</sup>Selbstverständlich sollen die Eigenwerte  $\pm\omega_{\mathbf{q}}$  zudem reell sein. Da aber  $\Omega$  selbst im allgemeinen nicht notwendigerweise eine hermitesche Matrix zu sein braucht, ist dies nicht gesichert. Solange aber der klassische Grundzustand, um den entwickelt wird, tatsächlich ein solcher ist, sind die Eigenwerte auch reell.

Terme in Bose-Operatoren, wodurch beim Aufstellen der Bewegungsgleichungen keine höheren Greenschen Funktionen entstehen. Die Greenschen Funktionen selbst können exakt bestimmt werden, denn die Näherung steckt bereits im linearisierten Hamilton-Operator. Nunmehr formuliert man die Bewegungsgleichungen für folgende Funktionen<sup>9</sup>:

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle a_{1\mathbf{q}}; a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad G_{11}^{++}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle a_{1-\mathbf{q}}^+; a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega. \quad (2.38)$$

Daraus entsteht ein lineares Gleichungssystem in geschlossener Form

$$\begin{pmatrix} 4Js - \omega & -4Js\gamma_{\mathbf{q}} \\ 4Js\gamma_{\mathbf{q}} & -4Js - \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ G_{11}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

dessen Lösung Polstellen bei  $\omega = \pm\omega_{1\mathbf{q}}$  mit  $\omega_{1\mathbf{q}} = 4Js\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{q}}^2}$  besitzt. Diese Polstellen stellen Einteilchenanregungen dar und sind mit den Spinwellendispersionen identisch [39]. In expliziter Form ergibt die Kramersche Regel für die gesuchten Funktionen

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4Js + \omega}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2}, \quad G_{11}^{++}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4Js\gamma_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2}. \quad (2.40)$$

Unter Verwendung von (2.18) kann  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$  auch durch transformierte Greensche Funktionen dargestellt werden:

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle u_{11\mathbf{q}}\alpha_{1\mathbf{q}} + v_{11\mathbf{q}}\alpha_{1-\mathbf{q}}^+; u_{11\mathbf{q}}^*\alpha_{1\mathbf{q}}^+ + v_{11\mathbf{q}}^*\alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega \quad (2.41)$$

oder ausgeführt

$$\begin{aligned} G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) &= u_{11\mathbf{q}}u_{11\mathbf{q}}^* \langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega + v_{11\mathbf{q}}v_{11\mathbf{q}}^* \langle\langle \alpha_{1-\mathbf{q}}^+; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega \\ &+ u_{11\mathbf{q}}v_{11\mathbf{q}}^* \langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega + v_{11\mathbf{q}}u_{11\mathbf{q}}^* \langle\langle \alpha_{1-\mathbf{q}}^+; \alpha_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Bezüglich der neuen Operatoren ist bereits gefordert worden, daß (2.13) dann diagonalisiert ist, also die Form

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{1\mathbf{q}} \alpha_{1\mathbf{q}}^+ \alpha_{1\mathbf{q}}$$

nimmt. Damit verschwinden nichtmagnonenzahlartige Funktionen in  $\alpha_{1\mathbf{q}}$ . Eine kurze Rechnung ergibt beispielsweise

$$\omega \langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega = \left\langle \left\langle \left[ \alpha_{1\mathbf{q}}, \sum_{\mathbf{q}'} \omega_{1\mathbf{q}'} \alpha_{1\mathbf{q}'}^+ \alpha_{1\mathbf{q}'} \right]_-; \alpha_{1-\mathbf{q}} \right\rangle \right\rangle_\omega = \omega_{1\mathbf{q}} \langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega,$$

woraus  $\langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega = 0$  folgt. Gleichsam erhält man wegen  $[\alpha_{1\mathbf{q}}, \alpha_{1\mathbf{q}}^+]_- = 1$  für die verbleibenden, magnonenzahlartigen Funktionen

$$\langle\langle \alpha_{1\mathbf{q}}; \alpha_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{\omega - \omega_{1\mathbf{q}}} \quad \text{sowie} \quad \langle\langle \alpha_{1-\mathbf{q}}^+; \alpha_{1-\mathbf{q}} \rangle\rangle_\omega = \frac{-1}{\omega + \omega_{1-\mathbf{q}}}.$$

---

<sup>9</sup>Für LSWT-typische Hamilton-Operatoren existieren immer geschlossene Sätze Greenscher Funktionen. Die entsprechenden Greenschen Funktionen sind durch ihre Bewegungsgleichungen miteinander verknüpft. Welche Funktionen zu einem Satz dazugehören, wenn man z.B. an der Magnetisierung im Untergitter  $m$  interessiert ist, ergibt die Auswertung der Bewegungsgleichung für  $\langle\langle a_{m\mathbf{q}}; a_{m\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega$ .

Die transformierten Greenschen Funktionen sind somit bekannt und können in (2.42) eingesetzt werden. Man gewinnt daraus mit  $\omega_{1-\mathbf{q}} = \omega_{1\mathbf{q}}$

$$\frac{4Js + \omega}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} = \frac{u_{11\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}}^*}{\omega - \omega_{1\mathbf{q}}} - \frac{v_{11\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}}^*}{\omega + \omega_{1\mathbf{q}}}. \quad (2.43)$$

Erweitern des soeben gefundenen Ausdrucks mit  $\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2$  liefert

$$4Js + \omega = u_{11\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}}^* (\omega + \omega_{1\mathbf{q}}) - v_{11\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}}^* (\omega - \omega_{1\mathbf{q}}),$$

so daß die gesuchten Koeffizienten durch Einsetzen von  $\omega = \pm \omega_{1\mathbf{q}}$  bestimmt werden können. Das Ergebnis ist bekannt und lautet ebenfalls

$$u_{11\mathbf{q}} u_{11\mathbf{q}}^* = 1/2 + 2Js/\omega_{1\mathbf{q}}, \quad v_{11\mathbf{q}} v_{11\mathbf{q}}^* = -1/2 + 2Js/\omega_{1\mathbf{q}}.$$

Offenbar bewirken die Bewegungsgleichungen, daß die Bogoliubov-Koeffizienten ohne weitere Annahmen korrekt herauskommen und (2.19) genügen.

Eine andere Möglichkeit, den Formalismus Greenscher Funktionen zu nutzen, bietet das Spektraltheorem. Dieser Weg führt ohne Bogoliubov-Transformation direkt zum Ziel. Später wird das Spektraltheorem in aller Ausführlichkeit verwendet, um Erwartungswerte zu berechnen. Für den Erwartungswert  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle$  ist das Spektraltheorem<sup>10</sup> durch

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega + i\epsilon) - G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega - i\epsilon)}{\exp(\omega/kT) - 1} d\omega \quad (2.44)$$

gegeben. Die entsprechende Greensche Funktion (2.40) ist bereits abgeleitet worden. Günstig ist jetzt ihre Darstellung als Partialbruch, welcher

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\frac{4Js + \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}}{\omega - \omega_{1\mathbf{q}}} - \frac{\frac{4Js - \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}}{\omega + \omega_{1\mathbf{q}}} \quad (2.45)$$

lautet. Daran kann die Dirac-Formel

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon} dx = \lim_{y \rightarrow \infty} \int_{-y}^{+y} \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0) \quad (2.46)$$

anknüpfen, die derartige Integrale zu behandeln gestattet. Dazu wird der Partialbruch in (2.44) eingesetzt, um anschließend durch Substitution der Integrationsvariablen  $\omega = \omega_1 \pm \omega_{1\mathbf{q}}$  dem Integral selbst eine Gestalt zu verleihen, die es erlaubt, die

---

<sup>10</sup>In allgemeiner Form [39] lautet das Spektraltheorem zur Bestimmung des Erwartungswertes  $\langle BA \rangle$

$$\langle BA \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} - \langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega-i\epsilon}}{\exp(\omega/kT) - \eta} d\omega + \frac{\eta + 1}{4\pi} C.$$

Aus dem Vergleich der bosonischen Erwartungswerte - einerseits mit der Kommutatorvariante und andererseits mit der Antikommutatorvariante berechnet - folgt, daß  $C$  im vorliegenden Fall verschwindet.

Dirac-Formel anzuwenden. Im Ergebnis erhält man daraus einen temperaturabhängigen Erwartungswert gemäß

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = \frac{\frac{4Js + \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}}{\exp(\omega_{1\mathbf{q}}/kT) - 1} - \frac{\frac{4Js - \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}}{\exp(-\omega_{1\mathbf{q}}/kT) - 1}. \quad (2.47)$$

Somit wäre für den Grundzustand das bekannte Ergebnis  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = -1/2 + 2Js/\omega_{1\mathbf{q}}$  reproduziert. Es soll jetzt gezeigt werden, wie man im Rahmen der LSWT unter Verwendung Greenscher Funktionen Spinkorrelationen und Energien berechnet. Bei der Bestimmung der Korrelationsfunktionen geht über (2.9) die klassische Orientierung der Spins ein. Außerdem ist zu beachten, durch welche Magnonensorte die jeweiligen Spins repräsentiert werden. Im vorliegenden Fall gibt es zwei Arten von denkbaren Korrelationen und nur eine Magnonensorte. Korrelierende Spins können zum einen parallel und zum anderen antiparallel sein. Handelt es sich um parallele Spins, die durch den Vektor  $\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}$  verbunden sind, so folgt aus (2.9)

$$\langle \mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}} \rangle = s^2 - s \left( \left\langle a_{1,m}^+ a_{1,m} + a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}}^+ a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}} - a_{1,m}^+ a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}} - a_{1,m} a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}}^+ \right\rangle \right)$$

bzw. für antiparallele Spins mit  $\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}$

$$\langle \mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}} \rangle = -s^2 + s \left( \left\langle a_{1,m}^+ a_{1,m} + a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}}^+ a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}} - a_{1,m}^+ a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}}^+ - a_{1,m} a_{1,m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}} \right\rangle \right).$$

Beide Relationen werden nun durch (2.12) Fourier-transformiert. Neben der Gültigkeit von  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = \langle a_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle - 1$  lässt sich leicht verifizieren, daß  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ \rangle = \langle a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}} \rangle$  gilt<sup>11</sup>, womit man

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\mathbf{r}_{\uparrow\uparrow}} \rangle &= s^2 - \frac{2s}{N} \sum_{\mathbf{q}} (1 - \cos(\mathbf{qr}_{\uparrow\uparrow})) \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle, \\ \langle \mathbf{S}_m \mathbf{S}_{m+\mathbf{r}_{\uparrow\downarrow}} \rangle &= -s^2 + \frac{2s}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle - \cos(\mathbf{qr}_{\uparrow\downarrow}) \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ \rangle \end{aligned} \quad (2.48)$$

erhält. Der Erwartungswert  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle$  ist bereits (2.47) zu entnehmen. Aus (2.40) gewinnt man nach Anwendung des Spektraltheorems

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ \rangle = \frac{2Js\gamma_{\mathbf{q}}}{\omega_{1\mathbf{q}}} \left( \frac{1}{\exp(\omega_{1\mathbf{q}}/kT) - 1} - \frac{1}{\exp(-\omega_{1\mathbf{q}}/kT) - 1} \right). \quad (2.49)$$

Die Energie  $E$  als Erwartungswert von  $H$  lässt sich nun ebenfalls bestimmen:

$$E = -2Ns^2 + \sum_{\mathbf{q}} 4Js \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle - 4Js\gamma_{\mathbf{q}} \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ \rangle.$$

Dann ergibt sich die bekannte Formel

$$E = -2Ns(s+1) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{1\mathbf{q}} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\omega_{1\mathbf{q}}/kT) - 1} \right) \quad (2.50)$$

---

<sup>11</sup>Dazu betrachte man die entsprechenden Greenschen Funktionen bzw. deren Bewegungsgleichungen.

mit der Grundzustandsenergie

$$E_0 = -2NJs(s+1) + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{1\mathbf{q}}/2.$$

Gleichung (2.50) läßt eine einfache Interpretation zu. Der temperaturabhängige Anteil ist nichts weiter als die mittlere Besetzungszahl der Magnonen in den einzelnen durch  $\mathbf{q}$  charakterisierten Zuständen multipliziert mit der entsprechenden Energie. Damit herrscht Konsistenz mit (2.15). Im übrigen läßt sich die Energiebeziehung zumindest in den Fällen, die der Autor untersucht hat und bei denen kein Magnetfeld zu berücksichtigen ist, generalisieren<sup>12</sup>. Betrachtet man ein Spinsystem im Rahmen der LSWT, dessen klassische Grundzustandsenergie durch  $As^2$  gegeben ist, wobei  $n$  verschiedene Magnonensorten zu unterscheiden sind, dann lautet die Verallgemeinerung von (2.50) wie folgt:

$$E = As(s+1) + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^n \omega_{m\mathbf{q}} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1} \right). \quad (2.51)$$

Zur Berechnung der Spinwellenenergie genügt demzufolge allein die Kenntnis der Dispersionen  $\omega_{m\mathbf{q}}$ , die sich immer als Eigenwerte einer Matrix darstellen lassen, die man erhält, wenn man einen geschlossenen Satz von Bose-Operatoren mit dem bosonischen Hamilton-Operator gemäß (2.23) vertauscht. Formel (2.51) erlaubt die Bestimmung der Energie auch dann, wenn das Spinsystem ungeordnet ist und sich Korrelationsfunktionen aus der Spinwellentheorie nicht ableiten lassen. Man denke in diesem Zusammenhang an die HAFM auf der linearen Kette und auf dem Kagomé-Gitter.

## 2.2 Das A-B-Gitter

Zu den Kupraten, die in den letzten Jahren eingehend theoretisch und experimentell untersucht wurden, zählen  $Ba_2Cu_3O_4Cl_2$  sowie  $Sr_2Cu_3O_4Cl_2$  [41, 42, 43, 44, 45]. Im Gegensatz zu  $La_2CuO_4$  besitzen diese Substanzen nicht die üblichen, einfach strukturierten  $Cu-O$ -Ebenen. Der wesentliche Unterschied besteht in der Existenz zusätzlicher  $Cu(B)$ -Atome, die im Zentrum jeder zweiten  $Cu(A)$ -Plakette zu finden sind. Beide Subsysteme formieren für sich Quadratgitter, die einander durchdringen. Dieses Gitter, welches in Abb. 2.2 dargestellt ist, wird als *A-B*-Gitter bezeichnet. Sowohl den  $Cu(A)$ - als auch den  $Cu(B)$ -Atomen ist der Spin  $s = 1/2$  zuzuordnen. Dies wiederum bedeutet, daß Quantenfluktuationen im Grundzustand einen wichtigen Einfluß auf die magnetische Ordnung ausüben. Da zum einen die Kopplungen  $J_{AA}$  zwischen *A-A*-Spins und  $J_{BB}$  zwischen *B-B*-Spins antiferromagnetisch sind und zum anderen die Kopplung  $J_{AB}$  zwischen *A-B*-Spins frustrierend wirkt, handelt es sich hierbei um zwei konkurrierende Spinsubsysteme.

Beispiele für zwei einander durchdringende Antiferromagnete in drei Dimensionen

---

<sup>12</sup>Allgemein gelangt man von  $As^2$  zu  $As(s+1)$  durch das "Symmetrisieren" der  $\mathbf{q}$ -abhängigen Terme im Hamilton-Operator entsprechend  $2a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} = a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^+ - 1$  unter der Maßgabe, daß im bosonischen Hamilton-Operator zu jedem Operatorprodukt auch das adjungierte Operatorprodukt aufzutragen hat. Dies betrifft ausschließlich die Terme, die durch die Multiplikation der  $z$ -Komponenten in (2.9) zustande kommen. Koppelt das Spinsystem mit einem magnetischen Feld, so ist mit dem resultierenden Term in gleicher Weise zu verfahren.

sind die Granate  $Mn_3Cr_2Ge_3O_{12}$  oder  $(Fe_xGa_{1-x})_2Ca_3Ge_3O_{12}$ , die von verschiedenen Autoren diskutiert wurden [46, 5, 47]. In den quasizweidimensionalen Kupraten wie  $(Ba, Sr)_2Cu_3O_4Cl_2$  spielen Quantenfluktuationen im Zusammenwirken mit konkurrierenden Wechselwirkungen eine entscheidendere Rolle als in den dreidimensionalen Granaten, so daß interessante physikalische Phänomene die Folge sind. So fanden Noro und Mitarbeiter [41] zwei magnetische Phasenübergänge bei  $T_A = 320K$  und bei  $T_B = 40K$ , die mit der magnetischen Ordnung im stark koppelnden A-Subsystem und im vergleichsweise schwach koppelnden B-Subsystem in Verbindung zu bringen sind. Beide Temperaturen differieren um eine Größenordnung, die als grobe Abschätzung das Verhältnis  $J_{AA}/J_{BB} = 10$  nahelegt, was durch Bandstrukturrechnungen belegt wird [48]. Experimentell gefunden wurde außerdem ein schwaches ferromagnetisches Moment [42], welches als Konsequenz pseudodipolarer Kopplungen verstanden werden kann [43].

Als Minimalmodell zur Beschreibung zweier Antiferromagnete mit konkurrierenden Wechselwirkungen auf dem A-B-Gitter wird im folgenden ein Hamilton-Operator vom Heisenberg-Typ mit drei Austauschkopplungen  $J_{AA}$ ,  $J_{BB}$  und  $J_{AB}$  herangezogen. Ein solches A-B-Modell liefert zwar keine Erklärung für das schwache ferromagnetische Moment, da dafür anisotrope Kopplungen verantwortlich zu sein scheinen [43, 44, 45], trotzdem ist es geeignet, den Einfluß von starken Quantenfluktuationen zusammen mit Frustration auf die magnetische Ordnung vor allem auch unter dem methodischen Aspekt zu studieren.

Im klassischen Limes findet man ein ganzes Spektrum magnetischer Grundzustandsphasen. Von experimenteller Relevanz ist der Fall eines kleinen  $J_{AB}$ . Dann ist jedes Subsystem für sich Néel-geordnet. Diese Phase ist über  $J_{AB} = 0$  hinaus energetisch stabil. Dadurch, daß sich das klassische Molekularfeld im Mittel heraushebt, sind beide Subsysteme magnetisch entkoppelt, und die Energie hängt selbst nicht von  $J_{AB}$  ab, solange dieser Parameter einen bestimmten Wert nicht überschreitet. Die Folge ist eine kontinuierliche Entartung der Energie bezüglich der relativen Orientierung beider Néel-Zustände. Ob es zur Aufhebung dieser Entartung im Quantenfall kommt, soll im Rahmen der LSWT geklärt werden. Käme es dazu, so würde es sich um ein Phänomen handeln, das man als *order-from-disorder*-Effekt bezeichnet. Gemeint ist damit die Ausbildung geordneter Strukturen trotz bzw. durch Fluktuationen. In Frage kommen neben thermischen Fluktuationen [6] auch Quantenfluktuationen. Schon in [44, 45] wird auf die Möglichkeit solcher Effekte in  $(Ba, Sr)_2Cu_3O_4Cl_2$  hingewiesen. Shender [5] machte als erster darauf aufmerksam, daß es eine ganze Reihe von Spinsystemen gibt, in denen Quantenfluktuationen kolineare Ordnung energetisch favorisieren. Ein Beispiel dafür ist das  $J_1$ - $J_2$ -Modell mit  $J_2 > J_1$ . Dort kommt es durch Quantenfluktuationen zur Entstehung sogenannter *stripe states* [7].

### 2.2.1 Das A-B-Modell und sein klassischer Grundzustand

Der Hamilton-Operator des A-B-Modells lautet

$$H = J_{AA} \sum_{(m \in A, n \in A)} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n + J_{BB} \sum_{(m \in B, n \in B)} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n + J_{AB} \sum_{(m \in A, n \in B)} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n, \quad (2.52)$$

wobei nur die Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn innerhalb und zwischen den Subsystemen von Null verschieden sind. Sowohl  $J_{AA}$  als auch  $J_{BB}$  seien antiferromagne-

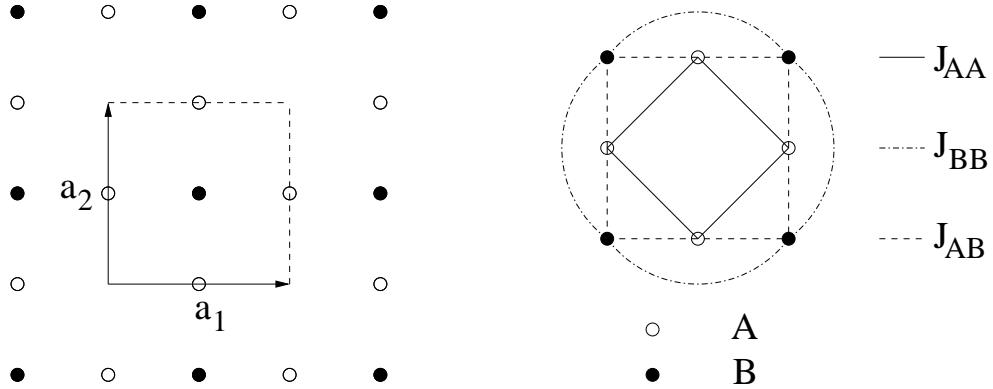


Abbildung 2.2: Die geometrische Einheitszelle des  $A$ - $B$ -Modells, die durch ihre Basisvektoren  $\mathbf{a}_1 = (a, 0)$  und  $\mathbf{a}_2 = (0, a)$  aufgespannt wird (links), mit den Austauschkopplungen entsprechend (2.52) (rechts).

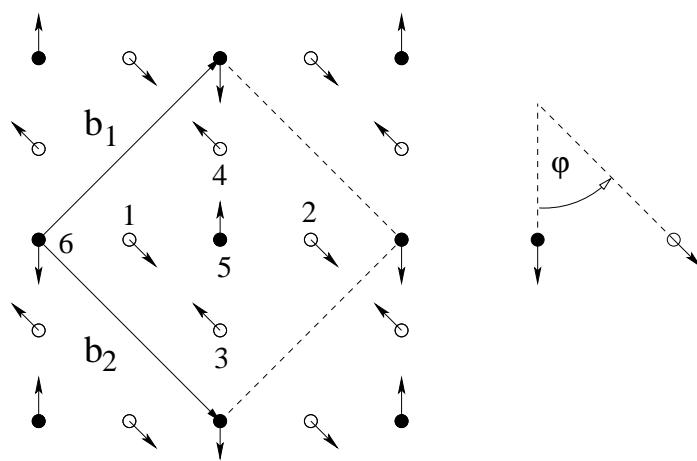


Abbildung 2.3: Der klassische Grundzustand für  $J_{AB} < 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$  (Tab. 2.1, Phase I). Beide Subsysteme sind Néel-geordnet. Weil das klassische Molekularfeld verschwindet, können beide Ordnungen um beliebige Winkel  $\varphi$  gegeneinander ausgerichtet sein. Die magnetische Einheitszelle mit den Basisvektoren  $\mathbf{b}_{1(2)} = \mathbf{a}_1 \pm \mathbf{a}_2$  enthält sechs Spins. Ein laufender Index  $m = 1, \dots, 6$  unterscheidet die Spins innerhalb der Zelle und korrespondiert mit den sechs später einzuführenden Magnonenarten.

Phase	Stabilitätsbereich	$\frac{E}{3Ns^2}$	$\frac{S_A}{2Ns}$	$\frac{S_B}{Ns}$	$\frac{S}{3Ns}$
I	$0 \leq J_{AB} \leq 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$	$-\frac{2}{3}J_{BB} - \frac{4}{3}J_{AA}$	0	0	0
II	$2\sqrt{J_{AA}J_{BB}} \leq J_{AB} \leq 2\sqrt{2}J_{AA}$	$-\frac{1}{6}\frac{J_{AB}^2}{J_{AA}} - \frac{4}{3}J_{AA}$	0	0	0
III	$2\sqrt{2}J_{AA} \leq J_{AB} \leq ()$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{4}{3}J_{AB}$	0	0	0
IV	$() \leq J_{AB} \leq ()$	(2.56)	(2.54)	(2.54)	(2.54)
V	$() \leq J_{AB}$	$-\frac{4}{3}J_{AB} + \frac{2}{3}J_{BB} + \frac{4}{3}J_{AA}$	1	1	1/3

Tabelle 2.1: Die fünf klassischen Grundzustandsphasen für  $J_{AB}, J_{BB} > 0$  und  $J_{BB} \leq J_{AA}$  mit  $S_{A(B)} = |\sum_{m \in A(B)} \mathbf{S}_m|$  als Gesamtspin der einzelnen Subsysteme sowie  $S = |\sum_m \mathbf{S}_m|$  als Gesamtspin beider Subsysteme.

tisch, d.h.  $J_{AA}, J_{BB} > 0$ . Die frustrierende Kopplung zwischen den Subsystemen  $J_{AB}$  tritt als freier Parameter in Erscheinung. Sie sei ebenfalls antiferromagnetisch. Insgesamt befinden sich  $3N$  Spins der Länge  $s$  im Gitter, dessen geometrische Elementarzelle nach Abb. 2.2 drei von ihnen enthält. Weiterhin ist die Zahl der Kopplungen bezogen auf eine geometrische Elementarzelle zehn.

Die Diskussion des klassischen Grundzustandes<sup>13</sup> entstammt [49, 50]. Bemerkenswert ist das äußerst reichhaltige Phasendiagramm. Legt man das Verhältnis  $J_{AA}/J_{BB} = 10$  der Untersuchung zugrunde, so existieren insgesamt fünf magnetische Grundzustandsphasen, deren Charakter man Tab. 2.1 entnehmen kann.

Es soll nun detailliert auf die einzelnen Phasen eingegangen werden. Die Phasen I und III besitzen eine planare Spinkonfiguration im Gegensatz zu den Phasen II und IV, die eine nonplanare Spinkonfiguration aufweisen. In Phase V sind die Spins kolinear ausgerichtet.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit definiere die planare Spinorientierung der Phasen I und III eine gedachte Ebene, bezüglich der die Lage der Spinvektoren im Raum beschrieben werden soll. Ausgangspunkt ist der Fall  $J_{AB} = 0$ . Trivialerweise sind dann beide Spinsubsysteme mit ihren Néel-Ordnungen magnetisch entkoppelt und beliebig zueinander orientiert. Dies ist auch dann noch der Fall, wenn  $J_{AB}$  vergleichsweise klein, trotzdem aber endlich ist. Ein solcher Zustand ist - wie eingangs bereits erwähnt - hochgradig entartet. Seine Energie ist von  $J_{AB}$  unabhängig. Mit  $\varphi$  besitzt man einen Parameter, der diesen kontinuierlichen Freiheitsgrad hinsichtlich der relativen Ausrichtung beider Spinsubsysteme parametrisiert. Auf Phase I wird im nächsten Abschnitt mittels LSWT näher eingegangen. Zu beantworten sein wird die Frage, ob Quantenfluktuationen die Entartung aufheben und kolineare Ordnung wie im Fall des  $J_1$ - $J_2$ -Modells

<sup>13</sup>Die Spins  $\mathbf{S}_m$  werden als Vektoren der Länge  $s$  betrachtet. Bezuglich der möglichen Orientierungen gibt es keine Einschränkungen. Gesucht ist die Konfiguration der niedrigsten Energie.

energetisch stabilisieren. An dieser Stelle sei bereits darauf verwiesen, daß kein reziproker Gittervektor  $\mathbf{Q}$  existiert, der es erlauben würde, statt der magnetischen die geometrische Elementarzelle im Rahmen der LSWT zu verwenden. Es wird sich demzufolge um eine Sechs-Magnonen-Theorie handeln.

Bei  $J_{AB} = 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$  kommt es zu einem Phasenübergang erster Ordnung von der planaren Phase I zur nonplanaren Phase II. In Abb. 2.4 ist diese Phase dargestellt. Die entsprechende magnetische Einheitszelle enthält zwölf Spins<sup>14</sup> mit acht verschiedenen Spinorientierungen.

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{A_1}^{II} &= s \left( -\frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), -\frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), \sin(\pm\alpha) \right), \\ \mathbf{S}_{A_2}^{II} &= s \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), \sin(\pm\alpha) \right), \\ \mathbf{S}_{A_3}^{II} &= s \left( -\frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), -\sin(\pm\alpha) \right), \\ \mathbf{S}_{A_4}^{II} &= s \left( \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), -\frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\alpha), -\sin(\pm\alpha) \right), \\ \mathbf{S}_{B_1}^{II} &= s(-1, 0, 0), \quad \mathbf{S}_{B_2}^{II} = s(0, -1, 0), \\ \mathbf{S}_{B_3}^{II} &= s(1, 0, 0), \quad \mathbf{S}_{B_4}^{II} = s(0, 1, 0).\end{aligned}\tag{2.53}$$

Minimieren der Energie liefert  $\cos(\alpha) = J_{AB}/\sqrt{8}J_{AA}$ . Benachbarte  $B$ -Spins stehen senkrecht aufeinander. Dasselbe gilt für die Komponenten der  $A$ -Spins in der  $x$ - $y$ -Ebene. Mit wachsendem  $J_{AB}$  nimmt jedoch ihre  $z$ -Komponente ab und wird Null bei  $J_{AB} = \sqrt{8}J_{AA}$ . An dieser Stelle erfolgt ein Phasenübergang zweiter Ordnung hin zur planaren Phase III. Hier findet man sowohl  $A$ - als auch  $B$ -Spins senkrecht aufeinander stehend vor. Folglich geht nur  $J_{AB}$  in die Energie ein. Bis hierher ist der Gesamtspin des Systems immer Null. Weiteres Anwachsen von  $J_{AB}$  erzwingt wiederum einen Phasenübergang zweiter Ordnung in die nonplanare Phase IV. Während eine antiparallele Ausrichtung der  $A$ -Spins relativ zu den  $B$ -Spins energetisch bevorzugt wird, sind die  $x$ - $y$ -Komponenten letzterer nach wie vor wie in den Phasen II und III orientiert. Trotzdem besitzen die Spins beider Subsysteme endliche  $z$ -Komponenten unterschiedlichen Vorzeichens, welche durch  $S_{m \in A}^z = s \cos \theta$  sowie  $S_{m \in B}^z = -s \sqrt{1 - A^2 \sin^2 \theta}$  gegeben sind. Eine solche Phase kann als verkannter Ferrimagnet bezeichnet werden [51] mit einem endlichen magnetischen Moment in beiden Subsystemen:

$$\frac{S_A^{IV}}{2Ns} = \sqrt{1 - \sin^2 \theta}, \quad \frac{S_B^{IV}}{sN} = \sqrt{1 - A^2 \sin^2 \theta}, \quad S^{IV} = |S_A^{IV} - S_B^{IV}|.\tag{2.54}$$

<sup>14</sup>Bezüglich einer darauf aufbauenden Spinwellentheorie sei folgendes angemerkt: Auf die magnetische Elementarzelle mit ihren zwölf Spins entfallen insgesamt vierzig Bindungen; davon sind sechzehn  $A$ - $A$ -, acht  $B$ - $B$ - und sechzehn  $A$ - $B$ -Kopplungen. Obwohl es sich um eine nonplanare Spinkonfiguration handelt, gilt für alle über  $J_{AA}$  koppelnden Spins  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n = -s^2 \sin^2(\alpha)$ . Alle über  $J_{BB}$  koppelnden Spins stehen senkrecht aufeinander:  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n = 0$ . Entsprechend findet man für alle über  $J_{AB}$  koppelnden Spins  $\mathbf{S}_m \mathbf{S}_n = -\sqrt{2} \cos(\alpha)/2$ . Das bedeutet wiederum, daß jeder Beitrag zur klassischen Energie in der Vielfachheit der entsprechenden Kopplung auftritt. Weiterhin verhält sich die geometrische zur magnetischen Elementarzelle bezogen auf die Spin- und Bindungszahlen wie eins zu vier. Vier ist aber auch ein gemeinsamer Teiler von sechzehn und acht, was die Reduktion auf das geometrische Gitter zuläßt. Deshalb genügt bei der Spinwellenrechnung ein Drei-Magnonen-Ansatz.

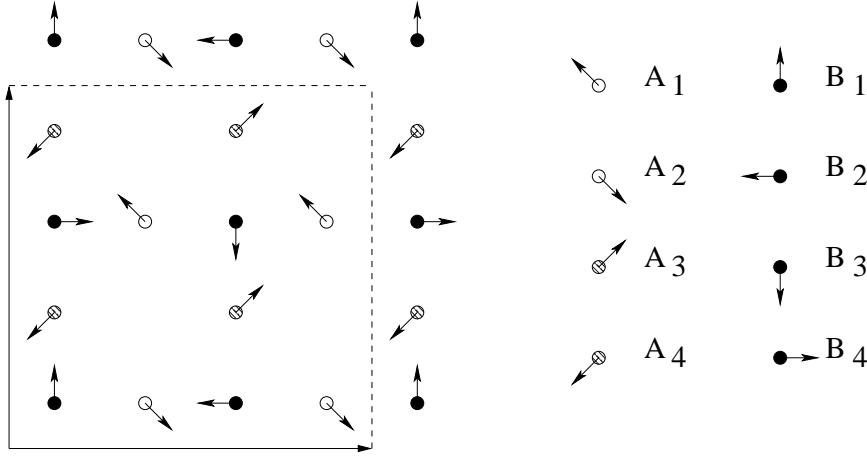


Abbildung 2.4: Die Spinorientierungen in den Phasen II, III. In der nonplanaren Phase II besitzen die  $A$ -Spins eine  $z$ -Komponente in entgegengesetzten Richtungen gemäß (2.53). Diese  $z$ -Komponente ist in der planaren Phase III Null. Beiden Phasen ist gemein, daß ihre magnetischen Elementarzellen zwölf Spins beinhalten.

Dabei sind

$$\begin{aligned} \sin \theta &= \sqrt{\frac{1 - \left( \frac{J_{AA}}{J_{AB}} + \frac{J_{AB}}{4J_{BB}} - \frac{1}{4} \sqrt{-24 \frac{J_{AA}}{J_{BB}} + 16 \frac{J_{AA}^2}{J_{AB}^2} + \frac{J_{AB}^2}{J_{BB}^2}} \right)^2}{-3 \frac{J_{AA}}{J_{BB}} + 2 \frac{J_{AA}^2}{J_{AB}^2} + \frac{J_{AB}^2}{8J_{BB}^2} + \left( \frac{3J_{AA}}{2J_{AB}} - \frac{J_{AB}}{8J_{BB}} \right) \sqrt{-24 \frac{J_{AA}}{J_{BB}} + 16 \frac{J_{AA}^2}{J_{AB}^2} + \frac{J_{AB}^2}{J_{BB}^2}}}}, \\ A &= \frac{J_{AB}}{2\sqrt{2}J_{BB}} - \sqrt{2} \frac{J_{AA}}{J_{AB}} - \sqrt{-3 \frac{J_{AA}}{J_{BB}} + 2 \frac{J_{AA}^2}{J_{AB}^2} + \frac{J_{AB}^2}{8J_{BB}^2}}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Der Gesamtspin des Systems wächst mit zunehmenden  $J_{AB}$ . In Phase IV verhält sich die Energie entsprechend

$$\begin{aligned} \frac{E_{IV}}{3N_S^2} &= \frac{4}{3} J_{AA} (1 - \sin^2 \theta) + \frac{2}{3} J_{BB} (1 - A^2 \sin^2 \theta) \\ &\quad - \frac{4}{3} J_{AB} \left( \frac{A}{\sqrt{2}} + \sqrt{(1 - \sin^2 \theta)(1 - A^2 \sin^2 \theta)} \right). \end{aligned} \quad (2.56)$$

Als Phasengrenze zwischen III und IV gewinnt man

$$J_{AB}^{III-IV} = \sqrt{2} J_{AA} + \frac{J_{BB}}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} \sqrt{8J_{AA}^2 + 24J_{AA}J_{BB} + 2J_{BB}^2}. \quad (2.57)$$

Darüber hinaus findet man einen weiteren Phasenübergang zweiter Ordnung von Phase IV nach Phase V, dem vollständig polarisierten Ferrimagneten, bei

$$J_{AB}^{IV-V} = 2J_{AA} + J_{BB} + \sqrt{4J_{AA}^2 + J_{BB}^2}. \quad (2.58)$$

## 2.2.2 Lineare Spinwellentheorie für $J_{AB} < 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$

Im vorigen Abschnitt wurde der klassische Grundzustand des  $A$ - $B$ -Modells diskutiert. Es konnte konstatiert werden, daß, falls  $J_{AB} < 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$  gilt, beide Subsysteme ent-

koppeln. Auf diesen Fall soll sich im folgenden konzentriert werden, um die Frage zu beantworten, ob, getrieben durch Quantenfluktuationen, die Entkopplung und gleichsam die damit verbundene Energieentartung bezüglich  $\varphi$  aufgehoben wird. Die entsprechenden Quantenkorrekturen im Grundzustand sollen unter Benutzung der LSWT erfaßt werden. Zur Diagonalisierung des bosonischen Hamilton-Operators werden Greensche Funktionen und das Spektraltheorem verwendet. Wie bereits erwähnt wurde, befinden sich  $3N$  Spins der Länge  $s$  im Gitter. Die magnetische Elementarzelle beinhaltet sechs Spins, so daß das magnetische Gitter aus  $N/2$  Zellen mit je zwanzig Bindungen besteht. Eine Reduktion auf das geometrische Gitter ist nicht möglich. Die Numerierung der einzelnen Spins und im Anschluß daran die der verschiedenen Magnonensorten erfolgt gemäß Abb. 2.3. Einsetzen des bosonisierten Skalarproduktes (2.9) in den Hamilton-Operator (2.52) unter Berücksichtigung der relativen Spinorientierungen in Phase I zusammen mit der Fourier-Transformation<sup>15</sup>

$$a_{n,\mathbf{R}} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{n\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}) \quad (2.59)$$

und  $\gamma_{1(2)\mathbf{q}} = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_{1(2)}/2)$  liefert den zu diagonalisierenden Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= -2N(2J_{AA} + J_{BB})s^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}} \quad \text{mit} \\ H_{\mathbf{q}} &= 4J_{AAS}(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}}) + 4J_{BBS}(a_{5\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{6\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{AAS}(\gamma_{1\mathbf{q}} \gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^* \gamma_{2\mathbf{q}}^*)(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{AAS}(\gamma_{1\mathbf{q}} \gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^* \gamma_{2\mathbf{q}})(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{BBS}(\gamma_{1\mathbf{q}}^2 + \gamma_{2\mathbf{q}}^2 + \gamma_{1\mathbf{q}}^{*2} + \gamma_{2\mathbf{q}}^{*2})(a_{5\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + a_{5\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) \\ &\quad + J_{ABS}(g+1)(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{1\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}}))/2 \\ &\quad + J_{ABS}(g-1)(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{1\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^))/2 \\ &\quad + J_{ABS}(g+1)(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{4\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{4\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}}))/2 \\ &\quad + J_{ABS}(g-1)(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{4\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{4\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^))/2 \\ &\quad - J_{ABS}(g-1)(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{2\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{2\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}}))/2 \\ &\quad - J_{ABS}(g+1)(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{2\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{2\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^))/2 \\ &\quad - J_{ABS}(g-1)(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{3\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{3\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+ + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}}))/2 \\ &\quad - J_{ABS}(g+1)(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{3\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + a_{4\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{3\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^))/2. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Dabei sind  $\mathbf{a}_{1(2)}$  die Basisvektoren des geometrischen Gitters mit der Gitterkonstanten  $a = 1$ :  $\mathbf{a}_1 = (1, 0)$  und  $\mathbf{a}_2 = (0, 1)$ . Außerdem ist  $g$  als  $\cos \varphi$  definiert. Zur Veranschaulichung dessen dient wiederum Abb. 2.3. Angesichts dieses Hamilton-Operators kann die eigentliche Frage, ob Quantenfluktuationen irgendwelche klassisch denkbaren Spinzustände energetisch bevorzugen, ohne weitere Rechnungen schon jetzt beantwortet werden. Die Quantenfluktuationen heben die klassische Energieentartung auf und stabilisieren kolineare Ordnung. Wie läßt sich das einsehen? In (2.60) taucht  $\varphi$  nur in

---

<sup>15</sup>  $\mathbf{R}$  ist der Spinplatz.

Gestalt von  $\cos \varphi$ -Terminen auf. Zur Erinnerung sei nochmals hervorgehoben, daß  $\varphi$  die relative Orientierung beider Spinsubsysteme parametrisiert. Dann sind auch die Eigenwerte von  $H$  Funktionen von  $\cos \varphi$ . Will man weiterhin die Grundzustandsenergie berechnen, so ist diese zunächst ebenfalls eine Funktion von  $\cos \varphi$ . Minimiert man letztere, um die bezüglich  $\varphi$  tiefste Energie zu finden, so entstehen beim Ableiten Ausdrücke, die proportional  $\sin \varphi$  sind, so daß die Grundzustandsenergie für  $\varphi = 0, \pi$  minimal wird<sup>16</sup>. Diese Aussage folgt genauso aus dem allgemeinen Hellman-Feynman-Theorem [52]. Es besagt, daß  $\partial E / \partial \lambda = \langle \partial H / \partial \lambda \rangle$  gilt, wobei  $H$  ein von einem Parameter  $\lambda$  abhängiger Hamilton-Operator und  $E$  einer seiner Eigenwerte ist. Die weitere Rechnung zeigt, daß beide Zustände energetisch gleichwertig sind. Insofern sind alle physikalischen Größen, die man im Rahmen der LSWT berechnen kann, von nun an als Mittelwerte über die Zustände  $\varphi = 0$  und  $\varphi = \pi$  zu verstehen. Allerdings genügt die Beschränkung auf  $\varphi = 0$ . Neben der Grundzustandsenergie sowie den Untergittermagnetisierungen bleiben auch die Korrelationen innerhalb der Subsysteme von der Wahl des  $\varphi$  unberührt. Einzig die Korrelationen zwischen den Subsystemen sind gesondert zu betrachten. Man kann sich dennoch leicht davon überzeugen, daß bei gegebenem  $n \in B, \mathbf{R}$  immer ein entsprechendes  $n' \in B, \mathbf{R}'$  existiert, so daß

$$\langle \mathbf{S}_{m \in A}(0) \mathbf{S}_{n \in B}(\mathbf{R}) \rangle_{\varphi=\pi} = \langle \mathbf{S}_{m \in A}(0) \mathbf{S}_{n' \in B}(\mathbf{R}') \rangle_{\varphi=0} \quad (2.61)$$

gilt. Mit  $\varphi = 0$  vereinfacht sich (2.60) zu

$$\begin{aligned} H &= -2N(2J_{AA} + J_{BB})s^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}} \quad \text{mit} \\ H_{\mathbf{q}} &= 4J_{AAS}(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}}) + 4J_{BBS}(a_{5\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{6\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{AAS}(\gamma_{1\mathbf{q}} \gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^* \gamma_{2\mathbf{q}}^*)(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{AAS}(\gamma_{1\mathbf{q}} \gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^* \gamma_{2\mathbf{q}})(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}}) \\ &\quad - J_{BBS}(\gamma_{1\mathbf{q}}^2 + \gamma_{2\mathbf{q}}^2 + \gamma_{1\mathbf{q}}^{*2} + \gamma_{2\mathbf{q}}^{*2})(a_{5\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + a_{5\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) \\ &\quad + J_{ABS}(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{1\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}})) \\ &\quad + J_{ABS}(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{4\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{4\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}})) \\ &\quad - J_{ABS}(\gamma_{1\mathbf{q}}(a_{2\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \gamma_{1\mathbf{q}}^*(a_{2\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}})) \\ &\quad - J_{ABS}(\gamma_{2\mathbf{q}}(a_{3\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + a_{4\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \gamma_{2\mathbf{q}}^*(a_{3\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}})). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Exemplarisch erfolgt nun die Berechnung der Untergittermagnetisierung  $\langle S_{1i}^z \rangle$  mithilfe Greenscher Funktionen. Auf eine Bogoliubov-Transformation kann verzichtet werden, da das Spektraltheorem benutzt wird. Zunächst einmal ist  $\langle S_{1i}^z \rangle$  der Erwartungswert der  $z$ -Komponente des Spins 1 in Zelle  $i$  nach Abb. 2.3. Gemessen wird diese  $z$ -Komponente in einem lokalen Koordinatensystem, das zuvor im Zusammenhang mit der Holstein-Primakoff-Transformation eingeführt wurde. Im übrigen hängt dieser Erwartungswert nicht von  $i$  ab, so daß der Index weggelassen werden kann:

$$\langle S_1'^z \rangle = s - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle. \quad (2.63)$$

---

<sup>16</sup>Im mathematisch strengen Sinne hat man lediglich potentielle Kandidaten für ein Extremum gefunden. Es läßt sich aber zeigen, daß es sich um Minima handelt.

Wegen des Spektraltheorems benötigt man die Greensche Funktion

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle a_{1\mathbf{q}}; a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad (2.64)$$

deren Bewegungsgleichung (2.37)

$$\begin{aligned} \omega G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 + 4J_{AA}sG_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}})G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}}^*)G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}^*G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &+ J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned} \quad (2.65)$$

lautet. Beim Aufstellen der Bewegungsgleichung tauchen weitere Greensche Funktionen der Form

$$G_{mn}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle a_{m\mathbf{q}}; a_{n\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad G_{mn}^{++}(\mathbf{q}, \omega) = \langle\langle a_{m-\mathbf{q}}^+; a_{n\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_\omega$$

auf, deren Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \omega G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) &= 4J_{AA}sG_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}}^*)G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}})G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &+ J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}^*G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), \\ \omega G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) &= J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}})G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &+ J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}}^*)G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) - 4J_{AA}sG_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}^*G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), \\ \omega G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) &= J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}}^*)G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &+ J_{AA}s(\gamma_{1\mathbf{q}}\gamma_{2\mathbf{q}}^* + \gamma_{1\mathbf{q}}^*\gamma_{2\mathbf{q}})G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) - 4J_{AA}sG_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}^*G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), \\ \omega G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) &= J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) + J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}^*G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}^*G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- 4J_{BB}sG_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + J_{BB}s(\gamma_{1\mathbf{q}}^2 + \gamma_{2\mathbf{q}}^2 + \gamma_{1\mathbf{q}}^{*2} + \gamma_{2\mathbf{q}}^{*2})G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ \omega G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) &= J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}^*G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) + J_{AB}s\gamma_{1\mathbf{q}}G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}^*G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) - J_{AB}s\gamma_{2\mathbf{q}}G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) \\ &- J_{BB}s(\gamma_{1\mathbf{q}}^2 + \gamma_{2\mathbf{q}}^2 + \gamma_{1\mathbf{q}}^{*2} + \gamma_{2\mathbf{q}}^{*2})G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + 4J_{BB}sG_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \end{aligned} \quad (2.66)$$

zusammen mit (2.65) ein geschlossenes, lineares Gleichungssystem liefern, welches nach  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$  aufzulösen ist. Unter Verwendung der Kramerschen Regel erhält man

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) / \prod_{m=1}^6 (\omega + (-1)^m \omega_{m\mathbf{q}}). \quad (2.67)$$

Die gesuchte Greensche Funktion besitzt demnach sechs Pole<sup>17</sup> bei

$$\omega = +\omega_{1\mathbf{q}}, -\omega_{2\mathbf{q}}, +\omega_{3\mathbf{q}}, -\omega_{4\mathbf{q}}, +\omega_{5\mathbf{q}}, -\omega_{6\mathbf{q}}.$$

---

<sup>17</sup>Im Nenner von (2.67) steht die Determinante der Koeffizientenmatrix des linearen Gleichungssystems. Sie ist ein Polynom sechsten Grades in  $\omega$  und kann daher entsprechend faktorisiert werden.

Zu identifizieren sind diese Lösungen mit den Spinwellendispersionen, für die keine analytische Darstellung durch elementare mathematische Funktionen existiert. Es sei daher nur der Limes  $J_{AB} = 0$  angegeben, was dem Fall zweier HAFM auf dem Quadratgitter entspricht:

$$\begin{aligned}\omega_{1\mathbf{q}} &= \omega_{2\mathbf{q}} = 4J_{AAS}\sqrt{1 - \cos^2 \frac{q_x}{2} \cos^2 \frac{q_y}{2}}, \\ \omega_{3\mathbf{q}} &= \omega_{4\mathbf{q}} = 4J_{AAS}\sqrt{1 - \sin^2 \frac{q_x}{2} \sin^2 \frac{q_y}{2}}, \\ \omega_{5\mathbf{q}} &= \omega_{6\mathbf{q}} = 4J_{BBS}\sqrt{\left(\sin^2 \frac{q_x}{2} + \sin^2 \frac{q_y}{2}\right)\left(\cos^2 \frac{q_x}{2} + \cos^2 \frac{q_y}{2}\right)}.\end{aligned}\quad (2.68)$$

Ein leicht modifiziertes Gleichungssystem existiert auch für die verbleibenden Greenschen Funktionen

$$G_{11}^{++}(\mathbf{q}, \omega), G_{21}^{++}(\mathbf{q}, \omega), G_{31}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), G_{41}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), G_{51}^{-+}(\mathbf{q}, \omega), G_{61}^{++}(\mathbf{q}, \omega).$$

Löst man dieses, so findet man die übrigen Pole:

$$\omega = -\omega_{1\mathbf{q}}, +\omega_{2\mathbf{q}}, -\omega_{3\mathbf{q}}, +\omega_{4\mathbf{q}}, -\omega_{5\mathbf{q}}, +\omega_{6\mathbf{q}}.$$

Normalerweise, d.h. hier  $\varphi$  beliebig, treten alle diese Greenschen Funktionen zusammen in einem Gleichungssystem auf, dessen Lösung der allgemeinen Philosophie entsprechend Pole bei  $\omega = \pm\omega_{m\mathbf{q}}, m = 1, \dots, 6$  hat. Doch durch die spezielle Wahl  $\varphi = 0, \pi$  zerfällt die Koeffizientenmatrix in zwei Blöcke, so daß zwei eigenständige Gleichungssysteme für die dazugehörigen Sätze Greenscher Funktionen entstehen. Um das Spektraltheorem und mit ihm die Dirac-Formel anwenden zu können, wird (2.67) als Parti-albruch aufgeschrieben:

$$g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) / \prod_{m=1}^6 (\omega + (-1)^m \omega_{m\mathbf{q}}) = \sum_{m=1}^6 \frac{A_m(\mathbf{q})}{(\omega + (-1)^m \omega_{m\mathbf{q}})}, \quad (2.69)$$

woraus

$$A_m(\mathbf{q}) = g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, (-1)^{m+1} \omega_{m\mathbf{q}}) / \prod_{n=1, n \neq m}^6 ((-1)^{m+1} \omega_{m\mathbf{q}} + (-1)^n \omega_{n\mathbf{q}}) \quad (2.70)$$

folgt. Einsetzen von (2.69) in (2.44) und Ausführen von (2.46) ergibt zunächst

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = \sum_{m=1}^6 \frac{A_m(\mathbf{q})}{\exp((-1)^{m+1} \omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1}. \quad (2.71)$$

Für den hier interessierenden Grundzustand erhält man daraus

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = -(A_2(\mathbf{q}) + A_4(\mathbf{q}) + A_6(\mathbf{q})). \quad (2.72)$$

Summation<sup>18</sup> bzw. Integration über die Brillouin-Zone liefert die gesuchte Untergittermagnetisierung  $\langle S_1'^z \rangle$ . Zum Test von (2.72) wird nochmals der Fall  $J_{AB} = 0$  überprüft,

<sup>18</sup>Die Summation erfolgt unter Ausschluß jener Punkte, die (2.72) divergieren lassen. So divergiert z.B. der Beitrag für  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  logarithmisch. Er wird durch das zweidimensionale Volumenelement beim Integrieren kompensiert.

welcher dann einer Vier-Magnonen-Theorie für den HAFM auf dem Quadratgitter mit einer Elementarzelle, die doppelt so groß wie die magnetische ist, entspricht. Man findet im Grundzustand

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = -\frac{1}{2} + \frac{1}{4\sqrt{1 - \cos^2 \frac{q_x}{2} \cos^2 \frac{q_y}{2}}} + \frac{1}{4\sqrt{1 - \sin^2 \frac{q_x}{2} \sin^2 \frac{q_y}{2}}}. \quad (2.73)$$

Mit  $\langle S_1'^z \rangle = s - 0.196$  wäre damit das bekannte Resultat von Anderson [53] reproduziert. Genausogut kann man nach den verbleibenden Untergittermagnetisierungen  $\langle S_m'^z \rangle$ ,  $m = 2, \dots, 6$  fragen. Deren Berechnung erfolgt im Prinzip auf dieselbe Art und Weise, nur daß entsprechend andere Greensche Funktionen abgeleitet werden müssen. Letztendlich ergibt sich allerdings folgende Eigenschaft:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle_A &\equiv \langle S_1'^z \rangle = \langle S_2'^z \rangle = \langle S_3'^z \rangle = \langle S_4'^z \rangle, \\ \langle S^z \rangle_B &\equiv \langle S_5'^z \rangle = \langle S_6'^z \rangle, \quad \langle S_A^z \rangle \neq \langle S_B^z \rangle. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Dieses Resultat ist vernünftig, da innerhalb der Subsysteme die Spins äquivalent sind. In Abb. 2.5 sind die Untergittermagnetisierungen über  $J_{AB}$  für  $J_{AA} = 1.00$ ,  $J_{BB} = 0.10$  und  $s = 1/2$  aufgetragen. Obwohl sich  $\langle S^z \rangle_A$  mit wachsendem  $J_{AB}$  verringert, bleibt die langreichweite Néel-Ordnung innerhalb der Phasengrenzen von I im A-Subsystem gegenüber Quantenfluktuationen stabil. Im Gegensatz dazu bricht die Néel-Ordnung im B-Subsystem bei  $J_{AB} \approx 0.58$  zusammen. Mit  $J_{AB} \approx 0.63$  ist der klassische Übergangspunkt deutlich größer. Der Einfluß der Quantenfluktuationen ist im schwächer gebundenen B-Subsystem offenbar stärker. Eine Analyse mittels Exakter Diagonalisierung (ED) für ein System aus 24 Spins (16 A-Spins und 8 B-Spins)  $s = 1/2$  stützt dieses Bild [49]. Man findet, daß bei den gegebenen Parameterverhältnissen mit zunehmendem  $J_{AB}$  die B-B-Korrelationen stärker unterdrückt werden als die A-A-Korrelationen. Es kann daher argumentiert werden, daß starke Quantenfluktuationen im Falle  $s = 1/2$  begünstigt durch Frustration zu einer neuen Grundzustandsphase führen, in der das A-Subsystem Néel-geordnet bleibt, während im B-Subsystem zunehmend Quantenunordnung auftritt. Ein ähnliches Verhalten weist ein frustrierter  $J_1$ - $J_2$ -Spin-1-Spin-1/2-Ferrimagnet auf einem Quadratgitter auf. Bei starker Frustration bleibt das Spin-1-Subsystem geordnet, während das Spin-1/2-Subsystem ungeordnet ist [51]. Eine weitere interessante Größe ist die Grundzustandsenergie  $E_0$ . Im klassischen Limes ist sie bekanntlich von  $J_{AB}$  unabhängig und hochgradig entartet. Durch Quantenfluktuationen wird diese Entartung aufgehoben und  $E_0$  eine Funktion von  $J_{AB}$ . Für die Grundzustandsenergie liefert die LSWT mit (2.51) folgenden Ausdruck:

$$E_0 = -2N(2J_{AA} + J_{BB})s(s+1) + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^6 \omega_{m\mathbf{q}}/2. \quad (2.75)$$

$E_0$  ist in Abb. 2.6 dargestellt. Zu beobachten ist eine leichte Abnahme der Grundzustandsenergie mit  $J_{AB}$  im Gegensatz zum klassischen Limes, wo sie bezüglich  $J_{AB}$  unverändert bleibt. Im Anschluß daran soll nun das Spektrum der Spinwellendispersionen eingehender untersucht werden. Es gibt also sechs nichtentartete Moden, wovon zwei optisch sind. Die übrigen sind akustischer Natur, wobei jeweils zwei auf jedes Subsystem entfallen. Weiterhin werden die akustischen Moden ausschließlich für  $\mathbf{q} = 0$  Null.

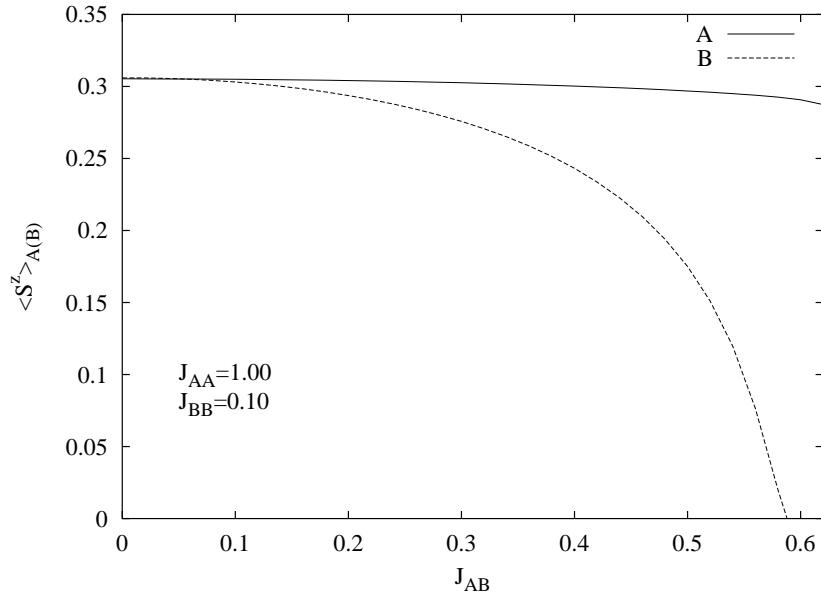


Abbildung 2.5: Untergittermagnetisierungen  $\langle S^z \rangle_A$  sowie  $\langle S^z \rangle_B$  als Funktionen von  $J_{AB}$  für  $s = 1/2$ .

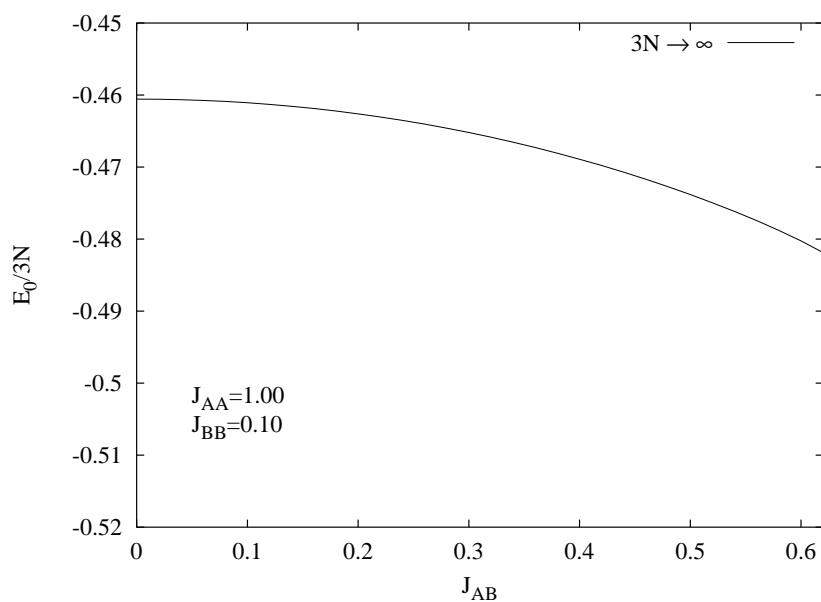


Abbildung 2.6: Grundzustandsenergie pro Spin  $E_0/3N$  als Funktion von  $J_{AB}$  für  $s = 1/2$ .

Aus der Entwicklung derselben um das Zentrum der Brillouin-Zone folgen die Spinwellengeschwindigkeiten. Es ist jedoch bereits weiter oben darauf hingewiesen worden, daß zumindest keine kompakte analytische Form für die Dispersionsrelationen existiert, weil sie Lösungen eines Polynoms sechsten Grades in  $\omega$  sind. Im folgenden wird daher kurz umrissen, wie man dennoch zu analytischen Ausdrücken für die Spinwellengeschwindigkeiten gelangt. Ausgangspunkt ist die Determinante der Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems (2.67). Um die Dispersionsrelationen zu gewinnen, ist im Prinzip die Determinante gemäß

$$(\omega - \omega_{1q})(\omega + \omega_{2q})(\omega - \omega_{3q})(\omega + \omega_{4q})(\omega - \omega_{5q})(\omega + \omega_{6q}) = 0 \quad (2.76)$$

zu faktorisieren, was im allgemeinen nicht möglich ist. Von Interesse sind aber nur die Lösungen in einer Umgebung von  $\mathbf{q} = 0$ . Dann ist bekannt:

- In der Umgebung des Zentrums der Brillouin-Zone sind die Dispersionsrelationen isotrop, d.h.  $\omega_{mq} \approx \omega_m(q)$  mit  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ .
- Darüber hinaus gilt für die vier akustischen Moden wegen der antiferromagnetischen Kopplungen  $\omega_m(q) = c_m q$ .

Deshalb ist die Determinante dergestalt zu entwickeln, daß nur Terme der Gestalt  $a_n \omega^n q^{4-n}$ ,  $n = 0, \dots, 4$  berücksichtigt zu werden brauchen, da die übrigen im Limes  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  schneller als die anderen verschwinden. Tut man dies, so findet man

$$\begin{aligned} & \omega^4 - 2 \left( 2J_{AA}^2 + 4J_{BB}^2 - \frac{J_{BB}J_{AB}^2}{J_{AA}} \right) s^2 \omega^2 q^2 \\ & + (32J_{AA}^2 J_{BB}^2 - 12J_{AA}J_{BB}J_{AB}^2 + J_{AB}^4) s^4 q^4 = 0. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Im Ergebnis besitzt (2.77) als Lösungen diejenigen Pole, die den akustischen Moden in der Umgebung von  $\mathbf{q} = 0$  zuzuordnen sind<sup>19</sup>:

$$\begin{aligned} \omega_1(q) &= \omega_2(q) = c_A q, \quad \omega_5(q) = \omega_6(q) = c_B q, \\ c_A &= s \sqrt{2J_{AA}^2 + 4J_{BB}^2 - \frac{J_{BB}J_{AB}^2}{J_{AA}}} + x, \\ c_B &= s \sqrt{2J_{AA}^2 + 4J_{BB}^2 - \frac{J_{BB}J_{AB}^2}{J_{AA}}} - x, \\ x &= \sqrt{(2J_{AA}^2 - 4J_{BB}^2)^2 + \frac{8J_{AB}^2}{J_{AA}^2} (J_{AA}^3 J_{BB} - J_{AA} J_{BB}^3) - \frac{J_{AB}^4}{J_{AA}^2} (J_{AA}^2 - J_{BB}^2)}. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Für genügend kleine  $q$  entarten sowohl die akustischen Moden im  $A$ -Subsystem  $(\omega_{1q}, \omega_{2q})$  als auch im  $B$ -Subsystem  $(\omega_{5q}, \omega_{6q})$ . Interessant ist die Tatsache, daß  $c_B$  am klassischen Phasenübergangspunkt  $J_{AB} = 2\sqrt{J_{AA}J_{BB}}$  Null wird<sup>20</sup>. Von da ab versagt

<sup>19</sup>Wegen (2.68) handelt es sich bei  $\omega_{3q}$  und  $\omega_{4q}$  um optische Moden. Beim Aufstellen von (2.77) wurden sie bereits abgespalten.

<sup>20</sup>Gleiches findet man in den zwei- und dreidimensionalen Versionen des  $J_1$ - $J_2$ -Modells [7, 34].

die Theorie, da komplexe  $\omega_{m\mathbf{q}}$  auftreten würden. Offenbar ist die LSWT sensitiv für das Verhalten des klassischen Systems<sup>21</sup>.

**Fazit:** Phase I, in der klassisch zwei Néel-geordnete Subsysteme koexistieren, die trotz einer frustrierenden Kopplung effektiv nicht miteinander wechselwirken, wurde mit den Methoden der LSWT näher untersucht. Dabei konnten zweierlei Effekte herausgearbeitet werden, die ihre Ursache im Zusammenspiel von Quantenfluktuationen und Frustration haben. Ausgehend von der Erkenntnis, daß Quantenfluktuationen die Entkopplung an sich aufheben, ist gezeigt worden, daß einerseits tatsächlich *order-from-disorder* auftritt, indem kolineare Spinordnung durch Quantenfluktuationen energetisch bevorzugt wird. Andererseits zerstören dieselben Quantenfluktuationen mit zunehmender Frustration diese Ordnung zumindest im schwächer gekoppelten *B*-Subsystem. Quantenfluktuationen führen zu einer  $J_{AB}$ -Abhängigkeit der Grundzustandsenergie.

---

<sup>21</sup>Klassische Spinwellen haben dieselben Dispersionsrelationen wie in der LSWT.

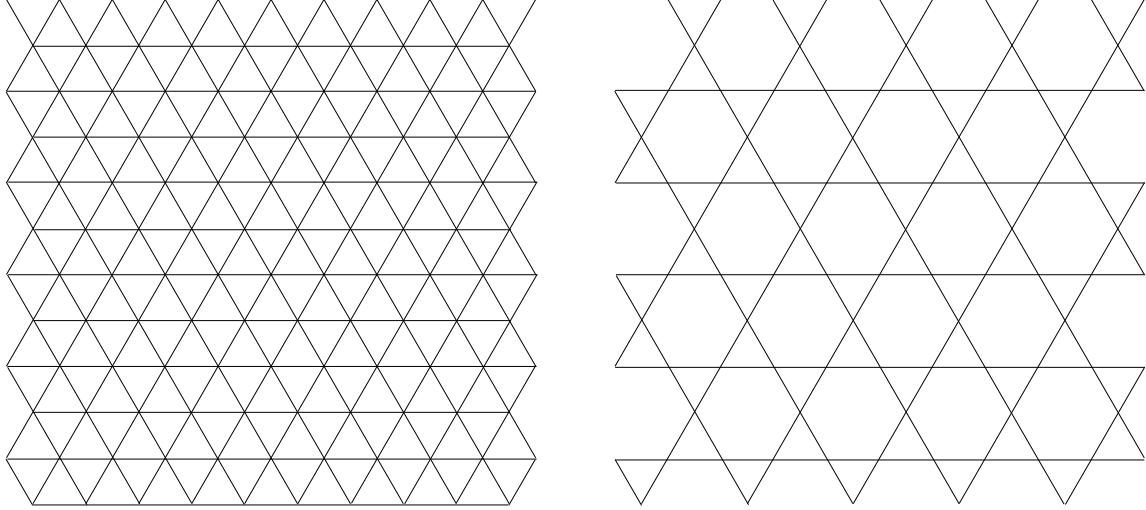


Abbildung 2.7: Das Dreiecksgitter (links) sowie das Kagomé-Gitter (rechts).

## 2.3 Das Maple-Leaf-Gitter

Im vorigen Abschnitt wurde das *A-B*-Modell hinsichtlich seiner magnetischen Ordnung im Grundzustand studiert. Letztendlich besteht das *A-B*-Modell aus zwei einander durchdringenden Quadratgittern. Ein Quadratgitter mit antiferromagnetischer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung ist nicht frustriert und besitzt einen geordneten Grundzustand [55]. Erst das Einschalten einer zusätzlichen, frustrierenden Kopplung zwischen beiden Gittern sorgt für die Zerstörung der langreichweitigen Ordnung. Weitere Kandidaten für Systeme mit einem magnetisch geordneten Grundzustand selbst im Fall  $s = 1/2$  sind der HAFM auf dem Honigwabengitter [56, 57] sowie entgegen früheren Arbeiten [58, 59] der HAFM auf dem Dreiecksgitter [60, 61, 62]. Das Honigwabengitter genauso wie das Quadratgitter sind geometrisch nicht frustriert. Quantenfluktuationen mindern in diesen Systemen sehr wohl die magnetische Fernordnung, doch nicht in dem Maße, daß diese Ordnung ganz verschwindet. Dagegen gehört der HAFM auf dem Dreiecksgitter zu einer eigenen Klasse von Spinsystemen. In ihnen tritt Frustration allein aus geometrischen Gründen auf. Der Parameter, der in diesen Systemen neben der Frustration den Einfluß der Quantenfluktuationen steuert, ist die Koordinationszahl  $z$ . In diesem Abschnitt soll  $z$  auf systematische Weise variiert und Heisenberg-Antiferromagnete auf drei verschiedenen, geometrisch frustrierten Gittern miteinander verglichen werden. Zum einen ist da das bereits erwähnte Dreiecksgitter entsprechend Abb. 2.7. Jeder Spin hat sechs nächste Nachbarn. Demzufolge besitzt das Dreiecksgitter die Koordinationszahl  $z = 6$ . Weiterhin kann man sich das Dreiecksgitter gemäß [16] um den Faktor  $1/4$  verdünnt vorstellen. Auf diese Weise gelangt man zum Kagomé-Gitter nach Abb. 2.7 mit vier nächsten Nachbarn, d.h.  $z = 4$ . Von diesem Gitter weiß man, daß sein Grundzustand zumindest für  $s = 1/2$  höchstwahrscheinlich durch eine Spinflüssigkeitsphase mit kurzreichweiter Ordnung charakterisiert ist [63, 64]. Mit diesen beiden Gittertypen hat sich bereits eine ganze Reihe von Autoren beschäftigt. Insbesondere existieren auch Arbeiten, die die LSWT in mehr oder weniger modifizierter Form anwenden (Dreiecksgitter [20, 17], Kagomé-Gitter [66, 67]).

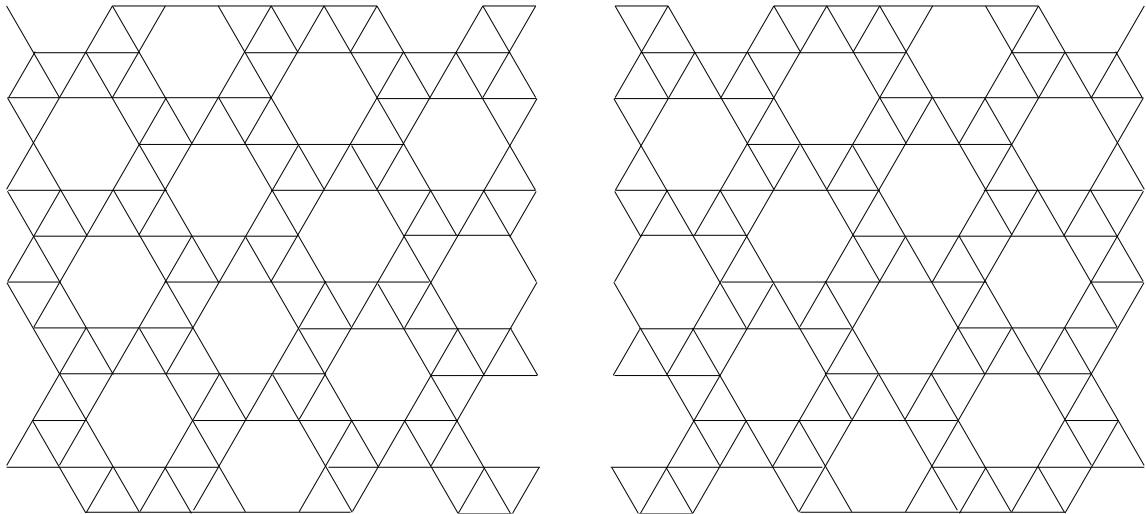


Abbildung 2.8: Die beiden Versionen des Maple-Leaf-Gitters.

Von Betts [16] stammt darüber hinaus der Vorschlag, im Dreiecksgitter jeden siebten Platz zu entfernen. Dies führt zu einem weiteren translationsinvarianten Gitter, dessen Koordinationszahl mit  $z = 5$  genau zwischen jener des Dreiecksgitters ( $z = 6$ ) und jener des Kagomé-Gitters ( $z = 4$ ) liegt. Betts bezeichnet dieses Gitter aufgrund gewisser Symmetrieeigenschaften als Maple-Leaf-Gitter. Von diesem Gitter existieren zwei verschiedene Varianten, die durch Spiegelung auseinander hervorgehen, wie man Abb. 2.8 entnehmen kann. Da im allgemeinen magnetische Ordnung durch Frustration und/oder niedrige Koordinationszahl geschwächt wird, erhebt sich sofort die Frage, ob es im Maple-Leaf-Gitter langreichweitige Ordnung gibt (Dreiecksgitter) oder nicht (Kagomé-Gitter). Im Rahmen der LSWT wird diese Frage nun näher untersucht. Um jedoch die zu gewinnenden Ergebnisse im richtigen Zusammenhang darstellen und deuten zu können, werden in der Folge die wesentlichen Spinwellenresultate in Bezug auf das Dreiecks- sowie das Kagomé-Gitter grob umrissen.

### 2.3.1 HAFM auf dem Dreiecksgitter

Wie üblich lautet der Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{\langle m,n \rangle} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n, \quad (2.79)$$

wobei  $J$  positiv ist und sich die Summation über nächste Nachbarn erstreckt<sup>22</sup>. Die geometrische Elementarzelle, deren Basisvektoren durch  $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}/2, 1/2)$  und  $\mathbf{a}_2 = (0, 1)$  gegeben sind, enthält einen Spin der Länge  $s$ . Es gebe  $N$  solcher Zellen, so daß die Zahl der Spins ebenfalls  $N$  ist. Distanzen sind im Gitter so skaliert, daß der Abstand zwischen benachbarten Spins eins ist. Zur Bestimmung des klassischen Grundzustandes wird von der geometrischen Elementarzelle ausgegangen und unterstellt, daß ein

---

<sup>22</sup>Auf jede geometrische Elementarzelle entfallen drei nichtäquivalente Bindungen zu nächsten Nachbarn.

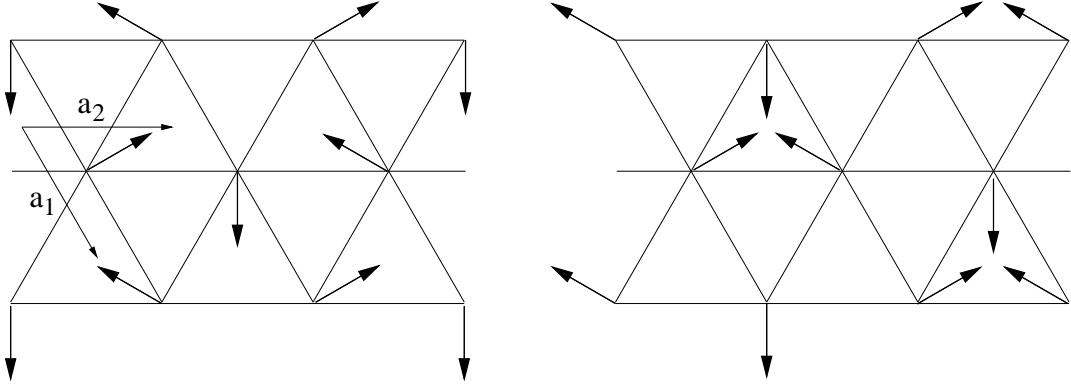


Abbildung 2.9: Die durch die magnetischen Ordnungsvektoren  $\mathbf{Q}$  charakterisierten klassischen Grundzustände des Dreiecksgitters:  $\mathbf{Q}_1$  (links),  $\mathbf{Q}_2$  (rechts). Die Drehung der Spins erfolgt im mathematisch positiven Sinn. Eingezeichnet sind auch die Basisvektoren des geometrischen Gitters.

reziproker Gittervektor  $\mathbf{Q}$  existiert<sup>23</sup>, der die magnetische Ordnung im Grundzustand beschreibt. Dadurch geht (2.79) in

$$E = JNs^2 [\cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{Q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))] \quad (2.80)$$

über. Der klassische Grundzustand ist zweifach entartet. Es existieren zwei nichtäquivalente  $\mathbf{Q}$  mit

$$\mathbf{Q}_1 = \frac{2\pi}{3}(0, 2) \quad , \quad \mathbf{Q}_2 = \frac{2\pi}{3}(\sqrt{3}, 1) . \quad (2.81)$$

Sie entsprechen den in Abb. 2.9 dargestellten Strukturen. Der Kosinus des eingeschlossenen Winkels benachbarter Spins ist  $-1/2$ . Demzufolge ist die klassische Grundzustandsenergie  $E = -3JNs^2/2$ .

Da die geometrische Elementarzelle zur Beschreibung des klassischen Grundzustandes ausreicht, genügt eine Ein-Magnonen-Theorie. In linearer Spinwellennäherung<sup>24</sup> transformiert sich (2.79) in

$$\begin{aligned} H &= -3JNs^2/2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\ H_{\mathbf{q}} &= 3Js a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} - 3Js \gamma_{\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ /4 - 3Js \gamma_{\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}} /4 \\ &\quad + Js \gamma_{\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} /4 + Js \gamma_{\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ /4 \end{aligned} \quad (2.82)$$

mit  $\gamma_{\mathbf{q}} = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_1) + \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_2) + \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1))$ . Daraus folgt die Spinwellendiffusions

$$\omega_{1\mathbf{q}} = Js \sqrt{(3 - (\gamma_{\mathbf{q}}^* + \gamma_{\mathbf{q}})/2)(3 + \gamma_{\mathbf{q}}^* + \gamma_{\mathbf{q}})} \quad (2.83)$$

und daraus die Grundzustandsenergie  $E_0$  sowie die Untergittermagnetisierung  $\langle S_1'^z \rangle$ :

$$E_0 = -3JNs(s+1)/2 + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{1\mathbf{q}}/2,$$

<sup>23</sup>Numerische Simulationen legen diesen Ansatz nahe.

<sup>24</sup>Lineare Terme heben sich heraus.

$$\langle S_1'^z \rangle = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle \equiv \langle S^z \rangle. \quad (2.84)$$

In Übereinstimmung mit [17, 18] erhält man im thermodynamischen Limes  $E_0/JN = -1.5s^2 - 0.327s$  sowie  $\langle S^z \rangle = s - 0.261$ . Damit besitzt die Untergittermagnetisierung einen endlichen Wert. Insofern bleibt die magnetische Fernordnung auch in Anwesenheit von Quantenfluktuationen erhalten. Trotzdem ist die Quantenkorrektur im geometrisch frustrierten Dreiecksgitter größer (0.261) als im unfrustrierten Quadratgitter (0.196). Man kann leicht einsehen, daß (2.83) einer akustischen Mode entspricht, die außer im Ursprung der Brillouin-Zone auch in den Punkten  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{1(2)}$  Null wird. Demzufolge lassen sich zwei Spinwellengeschwindigkeiten definieren, die gemäß [20] im Falle  $c_{\mathbf{q}=0}$  Oszillationen aus der Ebene heraus und im Falle  $c_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{1(2)}}$  Oszillationen in der Ebene beschreiben, wobei die genannte Ebene diejenige ist, die durch die klassische Ordnung festgelegt wird. Folgt man weiterhin der Notation von [20], so gilt

$$c_{\mathbf{q}=0} = c_{||} = \frac{\sqrt{27}Js}{2}, \quad c_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{1(2)}} = c_{\perp} = \frac{\sqrt{54}Js}{4}. \quad (2.85)$$

Mithilfe der hydrodynamischen Beziehung läßt sich die Spinsteifigkeit  $\rho$  berechnen [65, 20]. Sie ist ein zusätzlicher Parameter, der den Widerstand des Spinsystems gegenüber ordnungsmindernden Quantenfluktuationen charakterisiert. Unter der hydrodynamischen Beziehung versteht man die Formel  $\rho = c^2\chi$ . Dabei ist  $c$  die Spinwellengeschwindigkeit und  $\chi$  die Suszeptibilität. Im Sinne einer Entwicklung von  $\rho$  nach Potenzen von  $s$  ist der führende Term proportional zu  $s^2$ , der hier allein von Interesse sein soll. Dies wiederum bedeutet, daß die klassische Suszeptibilität zu bestimmen ist, die selbst nicht von  $s$  abhängt<sup>25</sup>.

Ohne auf Details einzugehen, findet man für die klassische Grundzustandsenergie in Anwesenheit eines schwachen Magnetfeldes  $\mathbf{H} = (h_x, h_y, h_z)$  folgende Relation:  $E = -3JNs^2/2 - N(h_x^2 + h_y^2 + h_z^2)/18J$ . Bezogen auf das Volumen  $V = N\sqrt{3}/2$  ergibt sich daraus die Suszeptibilität:

$$\chi = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial h_x^2} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial h_y^2} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial h_z^2} = \frac{2}{\sqrt{243}J}. \quad (2.86)$$

Entsprechend (2.85) lassen sich nunmehr zwei Spinsteifigkeiten ableiten:

$$\rho_{||} = \frac{\sqrt{3}Js^2}{2}, \quad \rho_{\perp} = \frac{\sqrt{3}Js^2}{4}. \quad (2.87)$$

Es gilt demnach  $\rho_{||}/\rho_{\perp} = 2$ . Zum späteren Vergleich seien noch die Arbeiten [53, 54] zitiert, die das Quadratgitter betreffen. In ihnen findet man

$$c_{||} = c_{\perp} = \sqrt{8}Js \quad \text{sowie} \quad \chi = \frac{1}{8J}, \quad (2.88)$$

woraus

$$\rho_{||} = \rho_{\perp} = Js^2 \quad (2.89)$$

mit  $\rho_{||}/\rho_{\perp} = 1$  folgt.

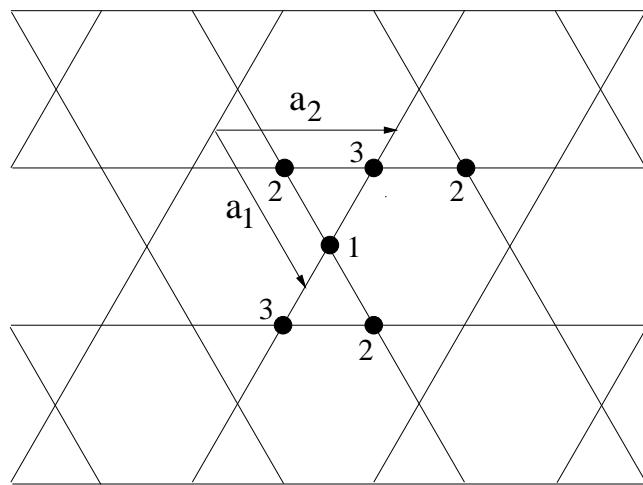


Abbildung 2.10: Das Kagomé-Gitter mit seiner geometrischen Elementarzelle, die durch  $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}, 1)$  sowie  $\mathbf{a}_2 = (0, 2)$  begrenzt wird. Die Numerierung der Spins innerhalb der Zelle dient der Unterscheidung der einzuführenden Magnonen.

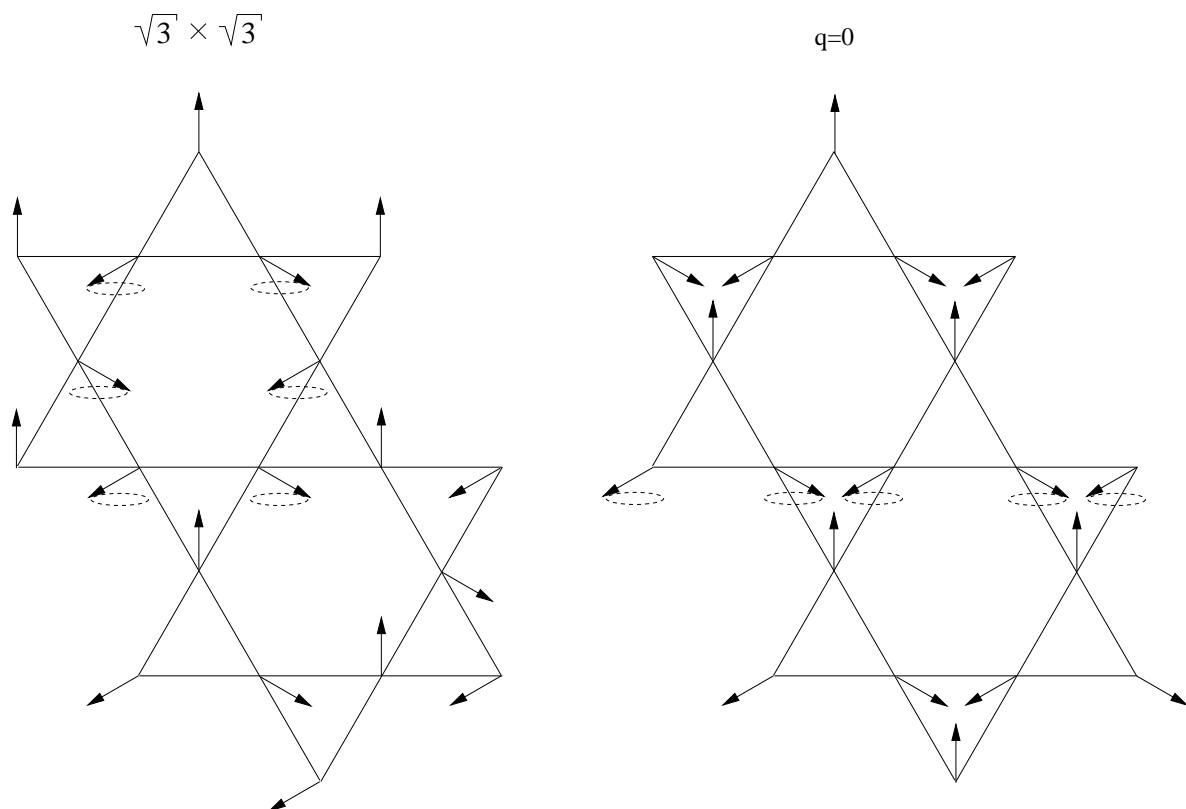


Abbildung 2.11: Zwei ausgewählte klassische Grundzustände des Kagomé-Gitters:  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Zustand (links),  $\mathbf{q} = 0$ -Zustand (rechts). Die gestrichelten Ellipsen deuten den hohen Entartungsgrad an, dem allein diese Zustände unterworfen sind.

### 2.3.2 HAFM auf dem Kagomé-Gitter

Die Verhältnisse beim Kagomé-Gitter sind wesentlich komplizierter. Wiederum wird ein Hamilton-Operator der Form (2.79) mit den entsprechenden Konventionen betrachtet. Die geometrische Elementarzelle, die durch die Basisvektoren  $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}, 1)$  sowie  $\mathbf{a}_2 = (0, 2)$  aufgespannt wird, enthält drei Spins der Länge  $s$ . Bei  $N$  Spins im Gitter gibt es also  $N/3$  geometrische Zellen, auf die jeweils sechs Bindungen entfallen. Der klassische Grundzustand des HAFM auf dem Kagomé-Gitter ist in der Literatur bereits eingehend diskutiert worden [66, 67, 71, 72, 73]. Im klassischen Grundzustand ist der Kosinus des eingeschlossenen Winkels benachbarter Spins wie beim Dreiecksgitter stets  $-1/2$ , so daß die klassische Grundzustandsenergie durch  $E = -JNs^2$  gegeben ist. Im Unterschied zum Dreiecksgitter gibt es jedoch unendlich viele nichttriviale Realisierungen eines klassischen Zustandes dieser Energie, d.h. der klassische Grundzustand ist hochgradig entartet [68]. In Abb. 2.11 sind zwei ausgewählte Varianten ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Zustand und  $\mathbf{q} = 0$ -Zustand) dargestellt. Dieses Bild entstammt [69], worin im einzelnen diese Zustände beschrieben werden. Wesentlich ist, daß im  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Zustand die magnetische Elementarzelle dreimal und im  $\mathbf{q} = 0$ -Zustand die magnetische Elementarzelle genauso groß wie die geometrische Elementarzelle ist. Trotzdem genügt in beiden Fällen eine Drei-Magnonen-Theorie<sup>26</sup>. Der Ansatz für eine LSWT um den  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Zustand unterscheidet sich durch nichts von dem Ansatz für eine LSWT um den  $\mathbf{q} = 0$ -Zustand [67]. Darüber hinaus gilt wegen (2.9) dieser Ansatz auch dann, wenn man irgend einen anderen klassischen Grundzustand herausgreift und ihn zum Ausgangspunkt einer linearen Spinwellenanalyse macht, weil auch dann der Kosinus des eingeschlossenen Winkels koppelnder Spins stets  $-1/2$  ist; zumindest auf der Ebene einer linearen Näherung ist kein klassischer Grundzustand gegenüber einem anderen ausgezeichnet. Der zu diagonalisierende Hamilton-Operator lautet in jedem Fall

$$\begin{aligned}
H &= -JNs^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\
H_{\mathbf{q}} &= 2Js(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}}) \\
&\quad - 3Js \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1/2)(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}})/2 \\
&\quad - 3Js \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_2/2)(a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}})/2 \\
&\quad - 3Js \cos(\mathbf{q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/2)(a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}})/2 \\
&\quad + Js \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1/2)(a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+)/2 \\
&\quad + Js \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_2/2)(a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+)/2 \\
&\quad + Js \cos(\mathbf{q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)/2)(a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+)/2. \tag{2.90}
\end{aligned}$$

Chubukov [70] argumentiert, daß auch im Kagomé-Gitter Quantenfluktuationen die klassische Entartung aufheben und auf diese Weise langreichweite Ordnung im Grundzustand ermöglichen. Damit wäre der HAFM auf dem Kagomé-Gitter ein weiterer Kandidat für ein Quantenspinsystem, in dem *order-from-disorder* auftritt. Allerdings können die LSWT wie auch andere Methoden [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]

<sup>25</sup>In linearer Näherung, d.h. auch im klassischen Fall, sind die Spinwellengeschwindigkeiten proportional zu  $s$ . Daher wird eigentlich die klassische Spindichte berechnet, die proportional zu  $s^2$  ist.

<sup>26</sup>Zwar existiert kein eindeutig definierbarer klassischer Ordnungsvektor. Dennoch geht in den jeweiligen bosonischen Hamilton-Operator neben der Kopplungskonstante  $J$  nur der Kosinus des eingeschlossenen Winkels koppelnder Spins ein - und der ist in jedem Fall  $-1/2$ .

diesen Effekt nicht reproduzieren. Bezuglich des linearen Spinwellenansatzes genügt ein Blick auf die Dispersionsrelationen, die sich aus (2.90) ergeben, um zu dem Schluß zu gelangen, daß in diesem System keine magnetische Ordnung auftritt. Neben zwei entarteten akustischen Moden existiert eine flache Nullmode:

$$\begin{aligned}\omega_{1\mathbf{q}} &= 0, \\ \omega_{2\mathbf{q}} &= \omega_{3\mathbf{q}} = 2J_s \sqrt{2 \cos^2 \frac{q_y}{2} + \left( \cos^2 \frac{\sqrt{3}q_x}{2} + \cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \left( 1 - 2 \cos^2 \frac{q_y}{2} \right)}.\end{aligned}\quad (2.91)$$

Wollte man z.B. die Untergittermagnetisierung berechnen, so würde der Summand/Integrand bei der Summation/Integration über die Brillouin-Zone in jedem Punkt wegen der flachen Nullmode divergieren [67], so daß man für die Untergittermagnetisierung selbst keinen endlichen Wert erhalten kann. Nichtsdestotrotz läßt sich über

$$E_0 = -JNs(s+1) + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^3 \omega_{m\mathbf{q}}/2 \quad (2.92)$$

die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes gemäß  $E_0/JN = -s^2 - 0.441s$  bestimmen<sup>27</sup>.

### 2.3.3 Der klassische Grundzustand des HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter

Als Hamilton-Operator dient (2.79) mit antiferromagnetischer Kopplung  $J$  ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn. Das Gitter enthalte  $N$  Spins der Länge  $s$ . Seine geometrische Elementarzelle wird durch die Vektoren  $\mathbf{a}_1 = \sqrt{7}(\sqrt{3}/2, 1/2)$  und  $\mathbf{a}_2 = \sqrt{7}(0, 1)$  gebildet. Dabei sind Distanzen im Gitter wiederum so bemessen, daß der Abstand zwischen benachbarten Spins eins ist. Auf jede Elementarzelle entfallen sechs Spins. Demzufolge gibt es  $N/6$  Zellen mit jeweils fünfzehn Bindungen.

Numerischen Untersuchungen zufolge ist der klassische Grundzustand planar und verkantet mit sechs magnetischen Untergittern [74, 75]. Die Orientierung eines klassischen Spins mit dem Index  $n$  im  $i$ -ten Hexagon  $\mathbf{R}_i$  entsprechend Abb. 2.12 kann wie folgt charakterisiert werden:

$$\mathbf{S}_{in} = s (\cos(\phi_n + \mathbf{Q}\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_1 + \sin(\phi_n + \mathbf{Q}\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_2), \quad (2.93)$$

wobei  $\mathbf{e}_{1(2)}$  beliebige, orthogonale Einheitsvektoren sind. Innerhalb eines Hexagons sind Spins mit geradem Index parallel. Dasselbe gilt für die übrigen Spins mit ungeradem Index. Weiterhin schließen nächstbenachbarte Spins entlang eines Hexagons den Winkel  $\alpha$  ein, was durch

$$\phi_n = \begin{cases} 0 & n = 1, 3, 5 \\ \alpha & n = 2, 4, 6 \end{cases}$$

---

<sup>27</sup> Im zweiten Teil dieser Arbeit steht das Kagomé-Gitter insbesondere aber seine dreidimensionale Variante im Mittelpunkt der Untersuchungen. Zur Anwendung kommt eine Methode, derer sich bereits in [28, 29] bedient wird.

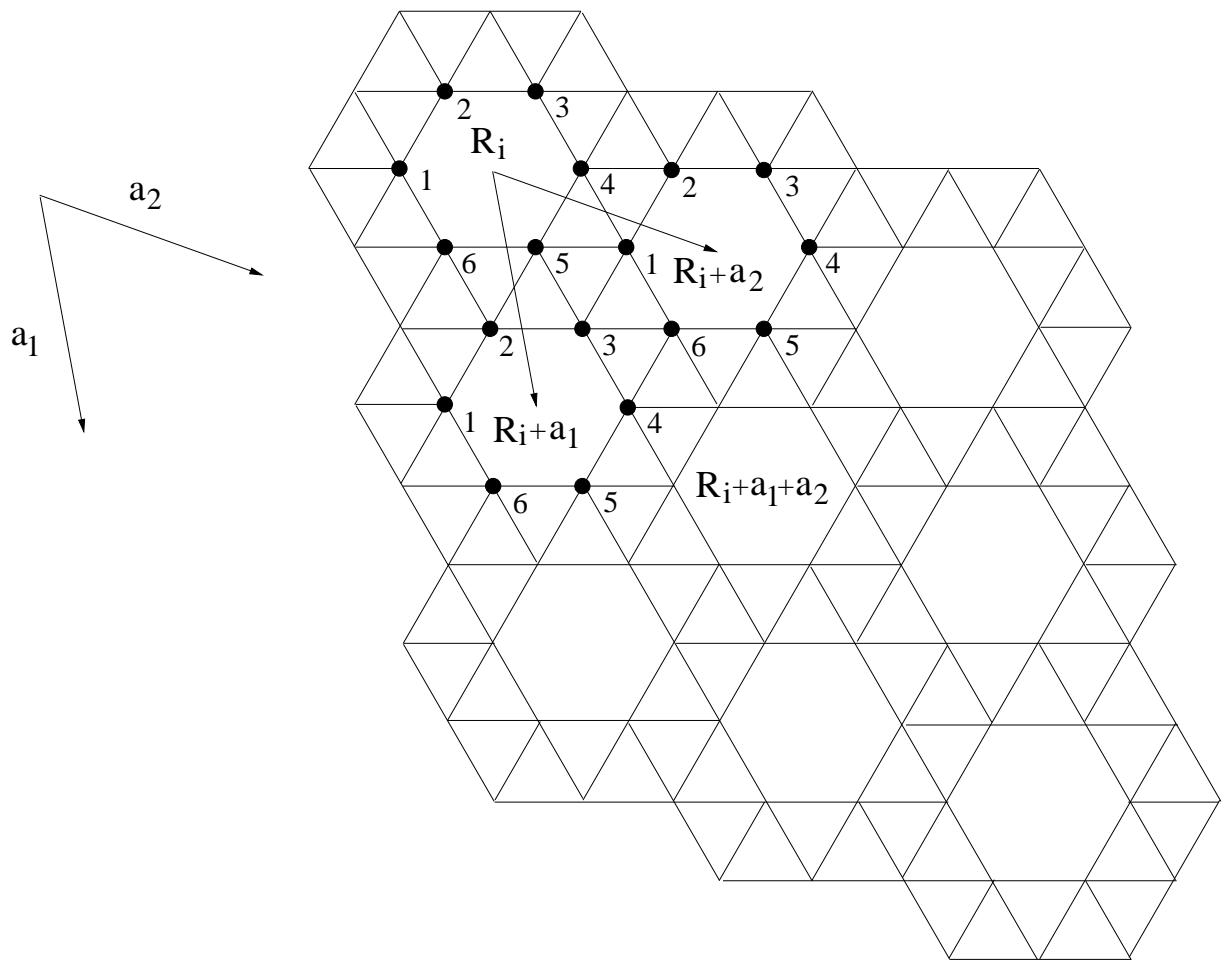


Abbildung 2.12: Die allen Berechnungen zugrunde liegende Variante des Maple-Leaf-Gitters. Sie entspricht der in Abb. 2.8 links dargestellten Version. Physikalisch völlig gleichwertig ist sein gespiegeltes Gegenstück. Die Indizes  $n = 1, \dots, 6$  numerieren die Spins innerhalb eines Hexagons durch. Genauso werden später die verschiedenen Magnonensorten unterschieden.

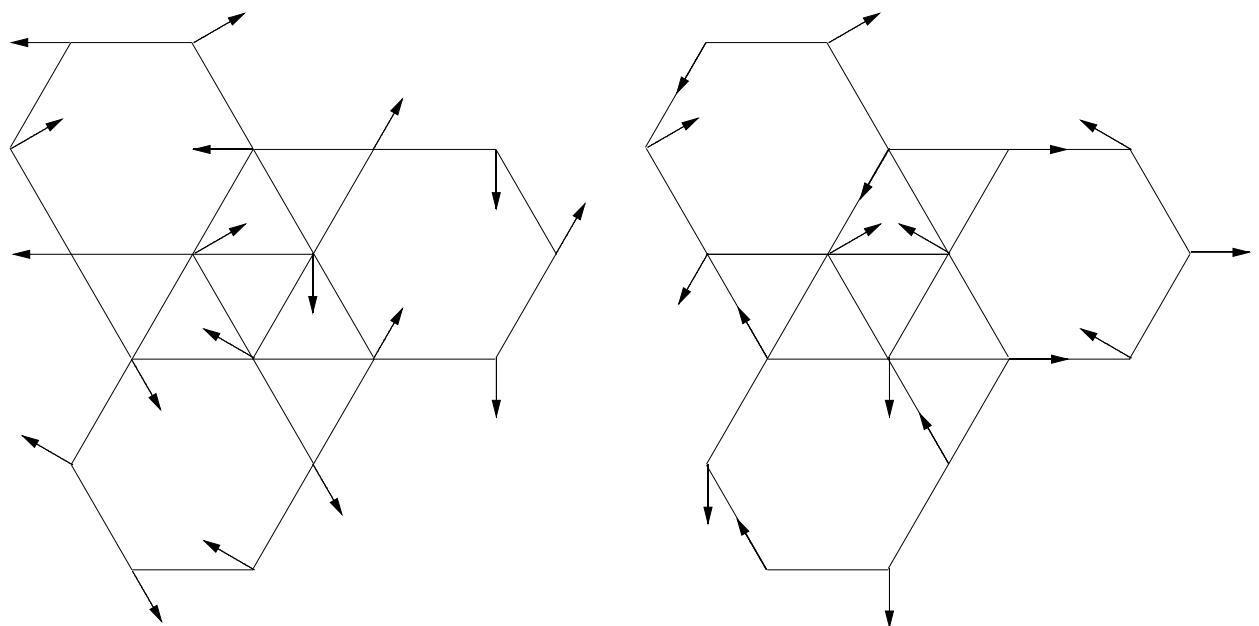


Abbildung 2.13: Die beiden entarteten klassischen Grundzustände des Maple-Leaf-Gitters,  $Q_1$  (links) und  $Q_2$  (rechts). In Richtung der Basisvektoren erfolgt die Drehung der Spins im mathematisch positiven Sinn.

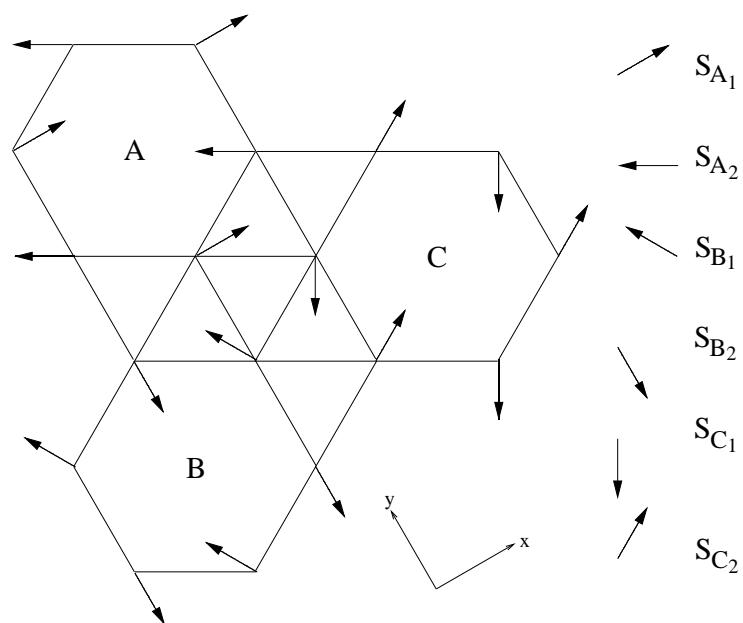


Abbildung 2.14: Zur Illustration von (2.96): Die sechs magnetischen Untergitter im durch  $Q_1$  charakterisierten Zustand. Das magnetische Feld greift senkrecht zur Papierebene an und bewirkt eine endliche  $z$ -Komponente der Spins, wobei die Orientierung der  $x$  ( $y$ )-Komponenten erhalten bleibt.

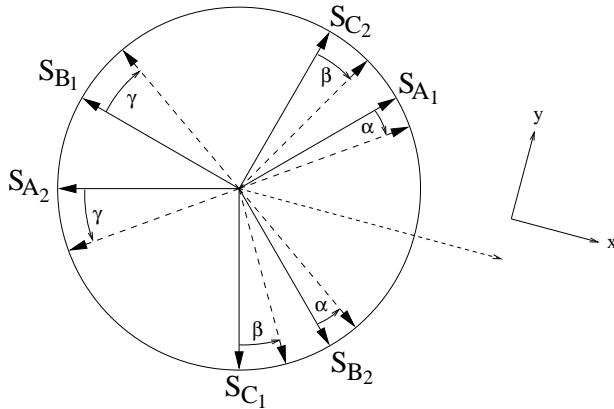


Abbildung 2.15: Zur Illustration von (2.100): Die sechs magnetischen Untergitter im durch  $\mathbf{Q}_1$  charakterisierten Zustand, wobei die gestrichelte Linie die Richtung des magnetischen Feldes  $\mathbf{H} = (h_{||}, 0, 0)$  angibt. Es bewirkt ein Eindrehen der Spins  $\mathbf{S}_{A_1}, \mathbf{S}_{B_2}$  in Feldrichtung um einen Winkel  $\alpha$ . Entsprechendes gilt für die Spins  $\mathbf{S}_{C_1}, \mathbf{S}_{C_2}$  und  $\mathbf{S}_{A_2}, \mathbf{S}_{B_1}$  um die Winkel  $\beta$  respektive  $\gamma$ .

ausgedrückt werden kann. Dann ist die klassische Grundzustandsenergie durch

$$\begin{aligned} E &= JNs^2 \cos \alpha + JNs^2 (\cos (\mathbf{Q}\mathbf{a}_1) + \cos (\mathbf{Q}\mathbf{a}_2) + \cos (\mathbf{Q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))) / 3 \\ &+ JNs^2 (\cos (\mathbf{Q}\mathbf{a}_1 + \alpha) + \cos (\mathbf{Q}\mathbf{a}_2 - \alpha) + \cos (\mathbf{Q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) - \alpha)) / 6 \end{aligned} \quad (2.94)$$

gegeben. Wie beim Dreiecksgitter findet man auch hier einen trivial entarteten Grundzustand. Es gibt zwei nichtäquivalente  $\mathbf{Q}$ , die gleichermaßen die Energie minimieren. Es sind dies

$$\mathbf{Q}_1 = \frac{2\pi}{3\sqrt{7}} (0, 2) \quad , \quad \mathbf{Q}_2 = \frac{2\pi}{3\sqrt{7}} (\sqrt{3}, 1) . \quad (2.95)$$

Einsetzen von  $\mathbf{Q}_1$  in (2.94) liefert ein absolutes Minimum für  $\alpha = 5\pi/6$ . Entsprechend erhält man  $\alpha = 7\pi/6$  unter Verwendung von  $\mathbf{Q}_2$ . In beiden Fällen gilt  $E = -JNs^2 (1 + \sqrt{3}) / 2$ . Im wesentlichen findet man wiederum eine  $120^\circ$ -Struktur, wie sie bereits beim Dreiecks- und Kagomé-Gitter auftritt. Anschaulich sind im Zustand  $\mathbf{Q}_1$  die Spins in Richtung von  $\mathbf{a}_1$  um  $2\pi/3$  und in Richtung von  $\mathbf{a}_2$  um  $4\pi/3$  gedreht. Genau umgekehrt ist es im Zustand  $\mathbf{Q}_2$ . Auf diese Weise befinden sich achtzehn Spins innerhalb der magnetischen Elementarzelle. Wegen der Existenz der Vektoren  $\mathbf{Q}_{1(2)}$  genügt später eine Sechs-Magnonen-Theorie.

An dieser Stelle sei darauf verwiesen, daß sich von nun an die weiteren Betrachtungen auf den Zustand  $\mathbf{Q}_1$  beziehen. Alle Aussagen gelten uneingeschränkt auch für den Zustand  $\mathbf{Q}_2$ .

Im Anschluß an die Spinwellentheorie soll die Spinstufigkeit in führender Ordnung  $s^2$  berechnet werden. Daher folgt nun die Ableitung der Suszeptibilität für das klassische Spinsystem. Zuerst wird der Fall untersucht, bei dem ein magnetisches Feld  $\mathbf{H} = (0, 0, h_{\perp})$  senkrecht zu der durch die planare Spinstruktur definierten Ebene angreift. Das Koordinatensystem zur Beschreibung der Spinvektoren ist so gelegt, daß für  $h_{\perp} = 0$  gemäß Abb. 2.14  $\mathbf{S}_{A_1} = s(1, 0, 0)$  sowie  $\mathbf{S}_{B_2} = s(0, -1, 0)$  gilt. Das Feld wird nun versuchen, die Spins aus der Ebene heraus um einen Winkel  $\alpha$  zu drehen,

so daß eine von Null verschiedene  $z$ -Komponente entsteht. In Kugelkoordinaten lautet der Ansatz für die Spinvektoren daher

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{A_1} &= s(\cos \alpha, 0, \sin \alpha), \quad \mathbf{S}_{A_2} = s\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \cos \alpha, \frac{1}{2} \cos \alpha, \sin \alpha\right), \\ \mathbf{S}_{B_1} &= s\left(-\frac{1}{2} \cos \alpha, \frac{\sqrt{3}}{2} \cos \alpha, \sin \alpha\right), \quad \mathbf{S}_{B_2} = s(0, -\cos \alpha, \sin \alpha), \\ \mathbf{S}_{C_1} &= s\left(-\frac{1}{2} \cos \alpha, -\frac{\sqrt{3}}{2} \cos \alpha, \sin \alpha\right), \quad \mathbf{S}_{C_2} = s\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \cos \alpha, \frac{1}{2} \cos \alpha, \sin \alpha\right),\end{aligned}\tag{2.96}$$

woraus unter Berücksichtigung des Feldterms  $-\mathbf{H}\mathbf{S}$ <sup>28</sup> folgt:

$$E = \frac{5JNs^2}{2} - JNs^2 \cos^2 \alpha \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 3\right) - h_{\perp}Ns \sin \alpha.\tag{2.97}$$

Die Energie wird minimal, falls  $\sin \alpha = h_{\perp}/Js(6 + \sqrt{3})$  gilt. Somit ist die klassische Grundzustandsenergie mit einem senkrecht angreifenden Feld durch

$$E = -\frac{JNs^2}{2} (1 + \sqrt{3}) - \frac{h_{\perp}^2 N}{2J(6 + \sqrt{3})}\tag{2.98}$$

gegeben. Bezogen auf das Volumen  $V = N7\sqrt{3}/12$  erhält man daraus in der Notation von [20] die Suszeptibilität  $\chi_{||}$  mit

$$\chi_{||} = \frac{4}{7J(1 + 2\sqrt{3})}.\tag{2.99}$$

Nun wird der andere Fall untersucht, bei dem ein magnetisches Feld in der Ebene an das Spinsystem koppelt. Die einzelnen Untergitter reagieren darauf unterschiedlich. In einem Koordinatensystem, in dem das Feld durch  $\mathbf{H} = (h_{||}, 0, 0)$  gegeben ist, wird entsprechend Abb. 2.15 der Ansatz

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{A_1} &= s\left(\frac{\sqrt{2}}{2}(\sin \alpha + \cos \alpha), -\frac{\sqrt{2}}{2}(\sin \alpha - \cos \alpha), 0\right), \\ \mathbf{S}_{A_2} &= s\left(\frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \sin \gamma - \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \cos \gamma, -\frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \sin \gamma - \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \cos \gamma, 0\right), \\ \mathbf{S}_{B_1} &= s\left(\frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \sin \gamma - \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \cos \gamma, \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \sin \gamma + \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \cos \gamma, 0\right), \\ \mathbf{S}_{B_2} &= s\left(\frac{\sqrt{2}}{2}(\sin \alpha + \cos \alpha), \frac{\sqrt{2}}{2}(\sin \alpha - \cos \alpha), 0\right),\end{aligned}$$

---

<sup>28</sup> $\mathbf{S}$  ist der Gesamtspin, also die Vektorsumme aller  $N$  Spins.

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{C_1} &= s \left( \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \sin \beta + \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \cos \beta, \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \sin \beta - \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \cos \beta, 0 \right), \\
\mathbf{S}_{C_2} &= s \left( \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \sin \beta + \frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \cos \beta, -\frac{\sqrt{6} - \sqrt{2}}{4} \sin \beta + \frac{\sqrt{6} + \sqrt{2}}{4} \cos \beta, 0 \right)
\end{aligned} \tag{2.100}$$

gewählt. Will man mit diesem Ansatz die klassische Grundzustandsenergie im Feld berechnen, indem alle relevanten Skalarprodukte unter Einbeziehung des Feldterms aufaddiert werden, um danach das energetische Minimum durch Ableiten nach  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  zu bestimmen, so gelangt man zu einem nichtlinearen Gleichungssystem, das sich einer analytischen Behandlung entzieht. Da aber andererseits die Suszeptibilität als Reaktion des Spinsystems im Limes eines verschwindenden magnetischen Feldes zu verstehen ist, genügt eine Betrachtung des Problems im Grenzfall eines hinreichend kleinen  $h_{||}$ . Dann sind die Abweichungen vom klassischen Grundzustand ohne Feld, die durch  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  beschrieben werden, ebenfalls klein. In diesem Sinne können alle auftretenden Winkel ausdrücke in der Energiebeziehung durch die ersten Glieder ihrer Taylor-Entwicklungen ersetzt werden, d.h.

$$\begin{aligned}
\sin \alpha &\rightarrow \alpha, \quad \cos \alpha \rightarrow 1 - \alpha^2/2, \\
\sin \beta &\rightarrow \beta, \quad \cos \beta \rightarrow 1 - \beta^2/2, \\
\sin \gamma &\rightarrow \gamma, \quad \cos \gamma \rightarrow 1 - \gamma^2/2.
\end{aligned}$$

Tut man dies und verfolgt weiterhin in konsistenter Weise den Gedanken, daß die gesuchte Suszeptibilität die lineare Reaktion des Spinsystems auf ein magnetisches Feld beschreibt, so sollte die Annahme  $\alpha, \beta, \gamma \sim h_{||}$  gerechtfertigt sein. Unter dieser Voraussetzung ergibt sich eine Energiebeziehung, die als Entwicklung nach Potenzen von  $h_{||}$  aufzufassen ist<sup>29</sup>. Zumindest bis zur zweiten Ordnung herrscht Konsistenz. Genau die Terme zweiter Ordnung sind aber diejenigen, die wegen  $\chi = -\lim_{h \rightarrow 0} \partial^2 E / \partial h^2$  entscheidend sind, so daß in der Konsequenz alle Beiträge höherer Ordnung von vornherein unberücksichtigt bleiben können. In diesem Sinne findet man für die Energie zunächst

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{JNs^2}{2} (1 + \sqrt{3}) - \frac{Ns\sqrt{2}}{6} h_{||} \alpha \\
&- \frac{Ns}{12} (\sqrt{6} + \sqrt{2}) h_{||} \beta - \frac{Ns}{12} (\sqrt{6} - \sqrt{2}) h_{||} \gamma \\
&+ \frac{JNs^2}{6} (\sqrt{3} + 1) (\alpha^2 + \gamma^2) + \frac{JNs^2}{6} (2\sqrt{3} + 1) \beta^2 \\
&+ \frac{JNs^2}{6} (\alpha\beta + \beta\gamma) + \frac{JNs^2}{6} (2\sqrt{3} - 1) \alpha\gamma.
\end{aligned} \tag{2.101}$$

Das Ableiten von (2.101) nach den Variablen  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  zur Bestimmung des absoluten Minimums führt auf ein lineares Gleichungssystem, dessen Lösung

$$\alpha = \frac{4 - \sqrt{3}}{13Js} \sqrt{2} h_{||}, \quad \beta = \frac{9 + \sqrt{3}}{78Js} \sqrt{2} h_{||}, \quad \gamma = \frac{-15 + 7\sqrt{3}}{78Js} \sqrt{2} h_{||} \tag{2.102}$$

---

<sup>29</sup>Die Energie im Feld läßt sich in aller Allgemeinheit als Entwicklung nach Potenzen der Feldkomponenten aufschreiben.

lautet. Einsetzen dieser Lösung in (2.101) liefert die klassische Grundzustandsenergie im Limes eines hinreichend kleinen Feldes zu

$$E = -\frac{JNs^2}{2} \left(1 + \sqrt{3}\right) - \frac{h_{||}^2 N}{3J(4 + \sqrt{3})}, \quad (2.103)$$

woraus bezogen auf das Volumen

$$\chi_{\perp} = \frac{8}{7J(3 + 4\sqrt{3})} \quad (2.104)$$

folgt. Die Resultate sind numerisch verifizierbar<sup>30</sup>.

### 2.3.4 Lineare Spinwellentheorie für den HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter

Nachdem im letzten Abschnitt die Natur des klassischen Grundzustandes untersucht wurde, kann sich nun der Frage zugewandt werden, inwieweit Quantenfluktuationen in der Lage sind, die klassische Fernordnung, die sich im wesentlichen nicht von der im Dreiecksgitter unterscheidet, zu beeinflussen oder gar zu zerstören. Diesem Zweck dient eine LSWT, in der um den klassischen Zustand  $\mathbf{Q}_1$  entwickelt wird<sup>31</sup>. Da ein  $\mathbf{Q}$ -Vektor existiert, der die klassische Ordnung ausgehend vom geometrischen Gitter erfaßt, sind nur sechs Magnonenarten einzuführen. Es handelt sich also um eine Sechs-Magnonen-Theorie. Jedem Platz innerhalb eines Hexagons wird eine eigene Magnonenart zugeordnet. Zur Unterscheidung dienen Indizes, die mit der Durchnumerierung der Spins in Abb. 2.12 korrespondieren. Mit  $\gamma_{n\mathbf{q}} = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_n)$  für  $n = 1, 2, 3$ , wobei explizit

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \frac{-3\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2}{7} = \frac{1}{\sqrt{28}} (-3\sqrt{3}, 1), \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{-\mathbf{a}_1 + 3\mathbf{a}_2}{7} = \frac{1}{\sqrt{28}} (-\sqrt{3}, 5), \\ \mathbf{r}_3 &= \frac{-2\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2}{7} = \frac{1}{\sqrt{28}} (-2\sqrt{3}, -4) \end{aligned}$$

gilt, sowie

$$a_{n,\mathbf{R}} = \sqrt{\frac{6}{N}} \sum_{\mathbf{q}} a_{n\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}) \quad (2.105)$$

---

<sup>30</sup>Insbesondere kann gezeigt werden, daß ein allgemeiner Ansatz mit beliebigen Feldkomponenten auf eine Energiebeziehung führt, die bei alleiniger Berücksichtigung aller Terme bis zur zweiten Ordnung in den Feldkomponenten die Gestalt

$$E = -\frac{JNs^2}{2} \left(1 + \sqrt{3}\right) - \frac{N}{3J(4 + \sqrt{3})} (h_x^2 + h_y^2) - \frac{N}{2J(6 + \sqrt{3})} h_z^2$$

hat.

<sup>31</sup>Der bosonische Hamilton-Opearator ist invariant gegenüber  $\mathbf{Q}_1 \leftrightarrow \mathbf{Q}_2$ .

unter Berücksichtigung von (2.9) ist der Fourier-transformierte Hamilton-Operator durch

$$\begin{aligned}
H &= -JNs^2 \left(1 + \sqrt{3}\right)/2 + Js \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}} \\
H_{\mathbf{q}} &= \left(1 + \sqrt{3}\right) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{4\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}} + a_{5\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + a_{6\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}}) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{2\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + \gamma_{2\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}} + \gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{4\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{4\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{5\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{5\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{2 + \sqrt{3}}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{6\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}) + \frac{2 - \sqrt{3}}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{6\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{4\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{4\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{3}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}}) + \frac{1}{4} (\gamma_{2\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}} + \gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{1}{2} (\gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{6-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}} a_{6-\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} (\gamma_{2\mathbf{q}}^* a_{3\mathbf{q}}^+ a_{6\mathbf{q}} + \gamma_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}} a_{6\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{1}{2} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{4-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{4-\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} (\gamma_{3\mathbf{q}}^* a_{1\mathbf{q}}^+ a_{4\mathbf{q}} + \gamma_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}} a_{4\mathbf{q}}^+) \\
&- \frac{1}{2} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{5-\mathbf{q}}^+ + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{5-\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} (\gamma_{1\mathbf{q}}^* a_{2\mathbf{q}}^+ a_{5\mathbf{q}} + \gamma_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}} a_{5\mathbf{q}}^+) \tag{2.106}
\end{aligned}$$

gegeben. Um obigen Hamilton-Operator zu diagonalisieren und physikalisch relevante Größen wie die Untergittermagnetisierung ableiten zu können, werden, weil ihre Handhabung äußerst praktikabel ist, Greensche Funktionen benutzt. Konkret soll als Ordnungsparameter der Erwartungswert der  $z$ -Komponente des Spins 1 in der Zelle  $\mathbf{R}_i$  gemäß Abb. 2.12 berechnet werden. Aufgrund der Translationsinvarianz des Hamilton-Operators hängt dieser Erwartungswert nicht von der Wahl des Gitterplatzes ab. Dadurch kann ein diesbezüglicher Index von vornherein weggelassen werden. Wegen

$$\langle S_1'^z \rangle = s - \frac{6}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle \tag{2.107}$$

wird zu Bestimmung von  $\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle$  über das Spektraltheorem die Greensche Funktion

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle \langle a_{1\mathbf{q}}; a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_\omega \quad (2.108)$$

benötigt. Die Vorgehensweise ist klar. Aufzustellen ist zunächst die Bewegungsgleichung (2.37) für  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$ . Durch den Kommutator  $[a_{1\mathbf{q}}, H]_-$  treten weitere Greensche Funktionen auf. Sie bilden einen geschlossenen Satz, und ihre Bewegungsgleichungen nehmen zusammen die Gestalt eines linearen Gleichungssystems an. Anders als beim  $A$ - $B$ -Modell, wo das Gleichungssystem durch die spezielle Wahl von  $\varphi$  in zwei äquivalente  $6 \times 6$ -Blöcke zerfiel, bilden die Koeffizienten hier eine  $12 \times 12$ -Matrix, die sich nicht auf diese Weise reduzieren lässt. Jede Greensche Funktion hängt von jeder anderen ab. Zur Illustration dessen sei die Bewegungsgleichung für  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$  einmal aufgeschrieben:

$$\begin{aligned} \omega G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) &= 1 + Js \left(1 + \sqrt{3}\right) G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) + Js \frac{2 - \sqrt{3}}{4} \gamma_{1\mathbf{q}}^* G_{21}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &\quad - Js \frac{2 + \sqrt{3}}{4} \gamma_{1\mathbf{q}}^* G_{21}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{Js}{4} \gamma_{1\mathbf{q}} G_{31}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &\quad - \frac{3Js}{4} \gamma_{1\mathbf{q}} G_{31}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{Js}{2} \gamma_{3\mathbf{q}}^* G_{41}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &\quad - \frac{Js}{2} \gamma_{3\mathbf{q}}^* G_{41}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + \frac{Js}{4} \gamma_{2\mathbf{q}} G_{51}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &\quad - \frac{3Js}{4} \gamma_{2\mathbf{q}} G_{51}^{++}(\mathbf{q}, \omega) + Js \frac{2 - \sqrt{3}}{4} \gamma_{3\mathbf{q}} G_{61}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) \\ &\quad - Js \frac{2 + \sqrt{3}}{4} \gamma_{3\mathbf{q}} G_{61}^{++}(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (2.109)$$

Auf die Angabe aller übrigen Bewegungsgleichungen soll wegen des Umfangs verzichtet werden. Dann liefert die bereits bekannte Kramersche Regel

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) / \prod_{m=1}^6 (\omega^2 - \omega_{m\mathbf{q}}^2), \quad (2.110)$$

wobei im Nenner in faktorisierter Form die Determinante der Koeffizientenmatrix steht. Die Spinwellenmoden sind mit den Polen  $\omega = \pm \omega_{m\mathbf{q}}$ ,  $m = 1, \dots, 6$  zu identifizieren. Eine flache Nullmode existiert nicht. Andernfalls könnte bereits an dieser Stelle die Rechnung abgebrochen werden, weil Divergenzen in den Summen/Integralen absehbar wären. In volliger Analogie zu den Ausführungen in Abschnitt 2.2.2 erfolgt nun die Partialbruchzerlegung von  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega)$ :

$$g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) / \prod_{m=1}^6 (\omega^2 - \omega_{m\mathbf{q}}^2) = \sum_{m=1}^6 \frac{A_m(\mathbf{q})}{\omega - \omega_{m\mathbf{q}}} + \frac{B_m(\mathbf{q})}{\omega + \omega_{m\mathbf{q}}} \quad (2.111)$$

mit

$$\begin{aligned} A_m(\mathbf{q}) &= g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, +\omega_{m\mathbf{q}}) / 2\omega_{m\mathbf{q}} \prod_{n \neq m} (\omega_{m\mathbf{q}}^2 - \omega_{n\mathbf{q}}^2), \\ B_m(\mathbf{q}) &= -g_{11}^{-+}(\mathbf{q}, -\omega_{m\mathbf{q}}) / 2\omega_{m\mathbf{q}} \prod_{n \neq m} (\omega_{m\mathbf{q}}^2 - \omega_{n\mathbf{q}}^2), \end{aligned} \quad (2.112)$$

woraus nach Anwendung des Spektraltheorems (2.44) im Grundzustand

$$\langle a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \rangle = - \sum_{m=1}^6 B_m(\mathbf{q}). \quad (2.113)$$

folgt. Integration von (2.107) im thermodynamischen Limes unter Verwendung von (2.113) liefert ein endliches, physikalisch vernünftiges  $\langle S_1'^z \rangle$ . Die Äquivalenz aller magnetischen Untergitter äußert sich darüber hinaus in der Tatsache, daß alle Untergittermagnetisierungen gleich sind:

$$\langle S_1'^z \rangle = \langle S_2'^z \rangle = \langle S_3'^z \rangle = \langle S_4'^z \rangle = \langle S_5'^z \rangle = \langle S_6'^z \rangle \equiv \langle S^z \rangle.$$

Es ist

$$\langle S^z \rangle = s - 0.346. \quad (2.114)$$

Obwohl die Quantenkorrektur (0.346) erheblich größer als beim Dreiecksgitter (0.261) ausfällt, erweist sich die klassische Fernordnung zumindest im Rahmen der LSWT als resistent gegenüber Quantenfluktuationen. Weiterhin lässt sich die Grundzustandsenergie angeben:

$$E_0 = -JN \left(1 + \sqrt{3}\right) s(s+1)/2 + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^6 \omega_{m\mathbf{q}}/2. \quad (2.115)$$

Im thermodynamischen Limes ergibt sich daraus  $E_0/JN = -0.546s^2 - 0.136s$ . Um das Bild, das sich abzuzeichnen beginnt, zu vervollständigen, soll jetzt die Spinstifigkeit in führender Ordnung  $s^2$  berechnet werden. Dazu ist allein das Spinwellenspektrum zu untersuchen, da die klassischen Suszeptibilitäten bereits bekannt sind. Trotzdem die  $\omega_{m\mathbf{q}}$  nicht in analytisch einfacher Form vorliegen, kann doch folgendes konstatiert werden:

- Es gibt eine akustische Mode. Die übrigen fünf sind optische Moden.
- Wie beim Dreiecksgitter wird die einzige akustische Mode nicht nur im Punkt  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  Null, sondern auch in den Punkten  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{1(2)}$ .
- Die akustische Mode ist linear und isotrop in der Umgebung ihrer Nullstellen.

Unter diesen Voraussetzungen können analytische Ausdrücke für die Spinwellengeschwindigkeiten gewonnen werden. Da die Pole der Greenschen Funktionen paarweise mit unterschiedlichem Vorzeichen auftreten und es nur eine akustische Mode gibt, wird die Determinante der Koeffizientenmatrix, deren Lösungen die Spinwellenmoden sind, in der Umgebung der Nullstellen entwickelt, wobei alle diejenigen Terme vernachlässigt werden, die nicht die Gestalt  $a_n \omega^n q^{2-n}$ ,  $n = 0, 2$  haben. Auf diese Weise erhält man in der Umgebung von  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$

$$8 \left(7 + 4\sqrt{3}\right) \omega^2 - 7J^2 \left(39 + 23\sqrt{3}\right) s^2 q^2 = 0 \quad (2.116)$$

und in der Umgebung der Punkte  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{1(2)}$

$$16 \left(97 + 56\sqrt{3}\right) \omega^2 - 7J^2 \left(407 + 235\sqrt{3}\right) s^2 q^2 = 0. \quad (2.117)$$

Gittertyp	$c_{\parallel}$	$c_{\perp}$	$\rho_{\parallel}$	$\rho_{\perp}$	$\rho_{\parallel}/\rho_{\perp}$	$\langle S^z \rangle$
Quadrat	1.4142135	1.4142135	0.25	0.25	1	0.304
Dreieck	1.2990381	0.9185586	0.2165063	0.1082532	2	0.239
Maple-Leaf	1.1127356	0.6774616	0.1584936	0.0528312	3	0.154

Tabelle 2.2: Die LSWT-Resultate für HAFM auf verschiedenen Gittertypen zum Vergleich: Spinwellengeschwindigkeit  $c$ , Spinsteifigkeit  $\rho$  und Untergittermagnetisierung  $\langle S^z \rangle$  im thermodynamischen Limes mit  $J = 1$  und  $s = 1/2$ .

Aus den Lösungen folgen die Spinwellengeschwindigkeiten:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{q}=0} &= c_{\parallel} = Js \frac{\sqrt{14}\sqrt{39+23\sqrt{3}}}{4(2+\sqrt{3})}, \\ c_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{1(2)}} &= c_{\perp} = Js \frac{\sqrt{7}\sqrt{407+235\sqrt{3}}}{4(7+4\sqrt{3})}. \end{aligned} \quad (2.118)$$

Man kann zeigen, daß in Analogie zum Dreiecksgitter  $c_{\mathbf{q}=0}$  Oszillationen aus der Ebene heraus und  $c_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{1(2)}}$  Oszillationen in der Ebene beschreiben [75]. Die besagte Ebene wird durch die planare klassische Spinordnung im Grundzustand vorgegeben. Dann lassen sich die Spinsteifigkeiten  $\rho_{\parallel}$  und  $\rho_{\perp}$  über die hydrodynamische Beziehung  $\rho = c^2 \chi$  bestimmen. Eine einfache Rechnung liefert

$$\rho_{\parallel} = \frac{Js^2(39+23\sqrt{3})}{2(31+18\sqrt{3})}, \quad \rho_{\perp} = \frac{Js^2(407+235\sqrt{3})}{2(963+556\sqrt{3})}. \quad (2.119)$$

Bemerkenswert ist die Tatsache, daß  $\rho_{\parallel}/\rho_{\perp} = 3$  gilt. In Tab. 2.2 sind die besprochenen Parameter für das Quadrat-, das Dreiecks- sowie das Maple-Leaf-Gitter einander gegenübergestellt. Offensichtlich ist die Tendenz, der  $c$ ,  $\rho$  und  $\langle S^z \rangle$  in gleicher Weise genügen. Sie sind am größten beim unfrustrierten Quadratgitter und am kleinsten beim Maple-Leaf-Gitter. Dies entspricht der Vorstellung, daß in einem frustrierten Spinsystem der Einfluß der Quantenfluktuationen vermehrt zum Tragen kommt, wenn zusätzlich die Koordinationszahl verringert wird. Die Untergittermagnetisierung des Maple-Leaf-Gitters ist im Rahmen der LSWT endlich. Inwieweit man diesem Resultat glauben darf<sup>32</sup>, offenbart ein Vergleich der LSWT-Resultate mit den Daten der Exakten Diagonalisierung (ED). In [75] ist dies anhand der Spin-Spin-Korrelationen in einem endlichen System aus  $N = 36$  Spins  $s = 1/2$  getan worden, wobei die sehr gute Übereinstimmung zwischen der LSWT-Näherung und den exakten Lanczos-Daten für die Güte der Theorie in diesem Fall spricht. Die Annahme eines quasiklassisch geordneten Grundzustandes ist also gerechtfertigt.

**Fazit:** Das Maple-Leaf-Gitter ist mit  $z = 5$  trotz Frustration noch ferngeordnet. Die klassische Ordnung wird nicht völlig zerstört. Der klassische Ordnungsparameter erfährt eine Quantenkorrektur, die freilich beim Dreiecksgitter mit  $z = 6$  geringer ausfällt. Ein zusätzlicher Anhaltspunkt dafür, daß die klassische Ordnung quasi erhalten bleibt, ist die gute Übereinstimmung zwischen LSWT und ED.

---

<sup>32</sup>Die Spinwellentheorie neigt zu einer Überbetonung der klassischen Ordnung.

# Kapitel 3

## Die rotationsinvariante Greenfunktionsmethode

### 3.1 Allgemeine Grundlagen

Der Formalismus der Greenschen Funktionen, der bereits im letzten Kapitel zur eleganten Diagonalisierung bosonischer Hamilton-Operatoren im Zusammenhang mit der LSWT herangezogen wurde, ist als eine universelle Methode in der theoretischen Physik anzusehen. Es ist kaum bekannt, daß Green ein gelernter Müller aus Nottingham war, der im Jahre 1828 einen grundlegenden Aufsatz veröffentlichte, in dem er das Konzept der nach ihm benannten Funktionen zur Lösung von Problemen aus der Elektrostatik benutzte [76]. Greensche Funktionen lassen sich z.B. als Reaktion eines physikalischen Systems auf eine äußere Störung definieren. Dabei ist die jeweilige Greensche Funktion eine für das System charakteristische Größe. In den letzten Jahrzehnten haben Greensche Funktionen vermehrt Verwendung bei der Untersuchung wechselwirkender Quantenvielteilchensysteme gefunden, zu denen Quantenspinsysteme zählen. Spinsysteme reagieren auf äußere Magnetfelder, welche eine Ausrichtung der magnetischen Momente bewirken. In welcher Weise dies geschieht, hängt vom Spinsystem selbst ab; maßgeblich ist selbstverständlich der Hamilton-Operator. Die dem Experiment direkt zugängliche Meßgröße, die die "Antwort" des Spinsystems auf die Störung von außen durch das Magnetfeld charakterisiert, wird als Suszeptibilität bezeichnet. Sie hängt im Rahmen der Kubo-Theorie der linearen Reaktion unmittelbar mit der Greenschen Funktion  $\langle\langle S_m^z; S_n^z \rangle\rangle_\omega$  zusammen<sup>1</sup> [39]. Für Greensche Funktionen lassen sich Bewegungsgleichungen aufstellen. Deren Lösung erlaubt über das Spektraltheorem die direkte Berechnung interessierender thermodynamischer Erwartungswerte. Alle nun folgenden Ausführungen beziehen sich auf diese Technik, die auf der Analyse entsprechender Bewegungsgleichungen beruht. Ein Problem, das beim Aufstellen einer Bewegungsgleichung und deren Auswertung auftritt, ist die Entstehung einer Hierarchie unendlich vieler Greenscher Funktionen beliebiger Ordnung. Die exakte Lösung der Bewegungsgleichung ist also im allgemeinen nicht möglich<sup>2</sup>. Greensche Funktionen höherer Ordnung enthalten

<sup>1</sup>Die Indizierung der Operatoren  $S_{m(n)}^z$  erfolgt in Anlehnung an (1.1). Es wird zweckmäßigerweise von einem Spinsystem auf einem Gitter ausgegangen.

<sup>2</sup>Ausnahmen bilden besonders einfache Hamilton-Operatoren ohne Wechselwirkung, wie sie beispielsweise in der LSWT auftreten.

Operatorprodukte. Um zu erzwingen, daß die Gleichungshierarchie irgendwo abbricht, sind diese Operatorprodukte in geeigneter Weise durch Erwartungswerte zu ersetzen, um Greensche Funktionen höherer Ordnung auf Greensche Funktionen niederer Ordnung zurückführen zu können. Je nach dem, auf welcher Ebene in der Hierarchie ein derartiger Abbruch erfolgt, entscheidet die damit verbundene Entkopplung im Prinzip über die Güte der Näherung. Wenn der Hamilton-Operator ungenähert eingeht, ist eine systematische Verbesserung prinzipiell möglich<sup>3</sup>. Die Methode, in der die Entkopplung bereits in der ursprünglichen Bewegungsgleichung für die gesuchte Greensche Funktion  $\langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$  erfolgt<sup>4</sup>, wird als Methode der zufälligen Phasen (RPA) bezeichnet [38, 39]. In dieser ersten Bewegungsgleichung tritt als einfachste Greensche Funktion höherer Ordnung  $\langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega$  mit  $H$  als dem Hamilton-Operator auf. Einen Schritt weiter geht man, wenn man  $\langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega$  nicht entkoppelt, statt dessen deren Bewegungsgleichung berücksichtigt und die Greensche Funktion  $\langle\langle [[A, H]_-, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega$  approximativ behandelt. Folgt man dieser Systematik weiter, so werden sich die Endresultate beliebig genau dem exakten Ergebnis angleichen. Ein solches Vorgehen ist aber kaum praktikabel, zumal der physikalische Erkenntnisgewinn den mathematischen Aufwand rechtfertigen sollte. Es ist aber so, daß wesentliche physikalische Eigenschaften bereits in den Bewegungsgleichungen für  $\langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega$  respektive  $\langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega$  enthalten sind. Deshalb ist es ausreichend, sich auf die Untersuchung der Gleichungen

$$\begin{aligned}\omega \langle\langle A; B \rangle\rangle_\omega &= \langle [A, B]_- \rangle + \langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega, \\ \omega \langle\langle [A, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega &= \langle [[A, H]_-, B]_- \rangle + \langle\langle [[A, H]_-, H]_- ; B \rangle\rangle_\omega\end{aligned}$$

zu beschränken<sup>5</sup>. Die RGM basiert auf diesen Gleichungen, wenn man die Operatoren  $A$  und  $B$  mit Spinerzeugungs- und Spinvernichtungsoperatoren identifiziert. Für die Behandlung eines rotationsinvarianten Hamilton-Operators (1.1) im Rahmen der RGM ist die Forderung, daß der thermodynamische Erwartungswert der  $z$ -Komponente eines jeden Spins im Gitter zu verschwinden hat, von entscheidender Bedeutung:  $\langle S_m^z \rangle = 0$ , wobei  $m$  den Platz im Gitter kennzeichnen soll<sup>6</sup>. Eine solche Nebenbedingung ist wegen der Rotationssymmetrie des Heisenberg-Modells, das keine Richtung im Raum auszeichnet, durchaus sinnvoll. Sie ist auch mit der Vorstellung eines magnetisch geordneten Quantenspinsystems vereinbar, weil auch dann eine gedachte Mitteilung über alle Richtungen dafür sorgen würde, daß  $\langle S_m^z \rangle = 0$  immer erfüllt ist. Magnetische Fernordnung wird, anders als in der LSWT, über langreichweite Korrelationen definiert. Auf einen bedeutenden Vorteil dieser Betrachtungsweise gegenüber der Spinwellentheorie ist schon in Kapitel 1 hingewiesen worden - demselben mathematischen Formalismus gelingt die quantitative Beschreibung sowohl von Ordnung als auch von Unordnung. Er erlaubt darüber hinaus auch das Studium von Phasenübergängen. Im Unterschied zur RPA, wo "überzählige" Operatoren oder Kombinationen davon einfach durch Erwartungswerte ersetzt werden, erfolgt das Entkoppeln in der RGM nicht nur auf einer höheren Stufe in der Gleichungshierarchie, sondern zusätzlich unter Berücksichtigung von Vertexparametern, die mit den entsprechenden Erwartungswerten multiplikativ

---

<sup>3</sup>Der bosonische Hamilton-Operator in der LSWT ist bereits eine Näherung.

<sup>4</sup> $A$  und  $B$  seien beliebige Operatoren.

<sup>5</sup>Es handelt sich hier um die Kommutatorvariante der allgemeinen Bewegungsgleichung [39].

<sup>6</sup>Auf eine problemangepaßte Indizierung soll an dieser Stelle noch verzichtet werden.

verknüpft werden.

Erstmalig haben Kondo und Yamaji [78] mithilfe dieser Methode die lineare Kette untersucht. Ihnen gelang damit die konsistente Beschreibung sowohl des ungeordneten Grundzustandes im Falle antiferromagnetischer Kopplung als auch die des geordneten Grundzustandes im Falle ferromagnetischer Kopplung. Anschließend hat sich vor allem innerhalb der letzten fünfzehn Jahre eine Vielzahl von Autoren - sicherlich anfangs motiviert durch die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung in den Kupraten - mit dieser Greenfunktionstechnik verstärkt beschäftigt und sie auf eine ganze Reihe denkbarer Gitterstrukturen und Modelle erfolgreich angewendet [28, 29, 80, 81, 31, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88].

## 3.2 Der Formalismus

Ziel dieser Methode ist das Berechnen von Korrelationsfunktionen des Typs  $\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle$ , wobei  $\mathbf{R}$  der Verbindungsvektor zwischen zwei Spins ist. Aufgrund der Rotationsinvarianz der Theorie gilt  $\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle = 3 \langle S_0^- S_{\mathbf{R}}^+ \rangle / 2 = 3 \langle S_0^z S_{\mathbf{R}}^z \rangle$ . Um über das Spektraltheorem den Erwartungswert  $\langle S_0^- S_{\mathbf{R}}^+ \rangle$  berechnen zu können, ist die Kenntnis der Greenschen Funktion  $\langle \langle S_{\mathbf{R}}^+; S_0^- \rangle \rangle_{\omega}$  erforderlich. Deren Bestimmung erfolgt auf der Basis der allgemeinen Bewegungsgleichung (2.37). Dem Problem angepaßt ist wiederum deren Kommutatorvariante:

$$\omega \langle \langle S_{\mathbf{R}}^+; S_0^- \rangle \rangle_{\omega} = \left\langle [S_{\mathbf{R}}^+, S_0^-]_- \right\rangle + \left\langle \left\langle [S_{\mathbf{R}}^+, H]_-; S_0^- \right\rangle \right\rangle_{\omega}.$$

Weil  $\langle S_{\mathbf{R}}^z \rangle$  wegen der Rotationsinvarianz an jedem Platz verschwinden soll, gilt  $\left\langle [S_{\mathbf{R}}^+, S_0^-]_- \right\rangle = 0$ . Mit dem Aufstellen von Bewegungsgleichungen für neu auftretende Greensche Funktionen höherer Ordnung gelangt man zu der für wechselwirkende Quantenvielteilchensysteme typischen algebraischen Gleichungskette, deren Auflösung praktisch unmöglich ist. In der RGM erfolgt die Entkopplung, die zum Abbruch der Gleichungshierarchie führt, in der Bewegungsgleichung für  $\langle \langle [S_{\mathbf{R}}^+, H]_-; S_0^- \rangle \rangle_{\omega}$ :

$$\omega \langle \langle [S_{\mathbf{R}}^+, H]_-; S_0^- \rangle \rangle_{\omega} = \left\langle [[S_{\mathbf{R}}^+, H]_-, S_0^-]_- \right\rangle + \left\langle \left\langle [[S_{\mathbf{R}}^+, H]_-, H]_-; S_0^- \right\rangle \right\rangle_{\omega}.$$

Der Kommutator  $[[S_{\mathbf{R}}^+, H]_-, H]_-$  enthält Produkte von drei Spinoperatoren. Die Entkopplung dieser Operatorprodukte erfolgt in einer Weise, auf die später im Detail eingegangen wird. Nach dem Entkoppeln ist das Problem im Rahmen der Näherung gelöst. Allerdings ist die Greensche Funktion dann selbst von  $\langle S_0^- S_{\mathbf{R}}^+ \rangle$  abhängig, so daß die verbleibende Aufgabe darin besteht,  $\langle S_0^- S_{\mathbf{R}}^+ \rangle$  selbstkonsistent zu berechnen. Damit ist die prinzipielle Vorgehensweise klar. Konkret geht es um die Behandlung des üblichen Hamilton-Operators des Heisenberg-Modells für  $s = 1/2$ :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, n\beta} \mathbf{S}_{m\alpha} \mathbf{S}_{n\beta}. \quad (3.1)$$

In dieser Form hat der Hamilton-Operator bezüglich der Indizierung und der Wahl des Vorfaktors  $1/2$  eine Gestalt, der die Ableitung allgemeiner Beziehungen erleichtert.

Die Summe läuft über alle Zellen und alle Spins. Der Faktor  $1/2$  gleicht das zweimalige Zählen jeder Bindung aus. Weiterhin indizieren  $m, n$  die relevanten Gitterzellen und  $\alpha, \beta$  numerieren die Spins innerhalb der Zellen durch. Bei der Wahl des Gitters gilt dieselbe Argumentation wie bei der Spinwellentheorie. Auch hier sollten gewisse Vorstellungen über den klassischen Grundzustand vorliegen. Es ist auf alle Fälle sinnvoll, das magnetische Gitter zum Ausgangspunkt der eigentlichen Rechnungen zu machen. Jedoch ist auch hier die Reduktion auf das geometrische Gitter möglich, falls ein die klassische Ordnung beschreibender reziproker Gittervektor  $\mathbf{Q}$  existiert. Letztendlich ist die Wahl des Gitters auch eine Frage der Intuition und der Erfahrung. Ganz allgemein kann an dieser Stelle nur konstatiert werden, daß das Gitter so gewählt werden muß, daß die Widerspruchsfreiheit in den Gleichungen gesichert ist<sup>7</sup>. Unter Benutzung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Spins wird (3.1) überführt in

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, n\beta} \left( S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z + \frac{1}{2} (S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^- + S_{m\alpha}^- S_{n\beta}^+) \right). \quad (3.2)$$

Für diese Operatoren gelten die bekannten Vertauschungsrelationen

$$[S^z, S^\pm]_- = \pm S^\pm, \quad [S^+, S^-]_- = 2S^z.$$

Mithilfe dieser Beziehungen soll nun die Greensche Funktion  $\langle\langle S_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_\omega$  berechnet werden. Gemäß der Kubo-Theorie wird die Größe  $-\langle\langle S_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_\omega$  als dynamische Suszeptibilität  $\chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)$  bezeichnet. Entsprechend ist die statische Suszeptibilität als  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)$  definiert. Bei  $S_{\mathbf{q}\alpha}^+$  und  $S_{\mathbf{q}\beta}^-$  handelt es sich um die Fourier-transformierten Operatoren  $S_{m\alpha}^+$  und  $S_{n\beta}^-$ . Vorausgesetzt, es gibt  $N$  Gitterplätze, so lautet die entsprechende Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} S_{m\alpha}^+ &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}), \\ S_{n\beta}^- &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}\beta}^- \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{n\beta}). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zur Berechnung der gesuchten Greenschen Funktion  $\langle\langle S_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_\omega$  dient - wie eingangs ausgeführt - die Kommutatorvariante der Bewegungsgleichung (2.37):

$$\omega \langle\langle S_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_\omega = \left\langle [S_{\mathbf{q}\alpha}^+, S_{\mathbf{q}\beta}^-]_- \right\rangle + \left\langle \left\langle [S_{\mathbf{q}\alpha}^+, H]_-; S_{\mathbf{q}\beta}^- \right\rangle \right\rangle_\omega. \quad (3.4)$$

Über den Erwartungswert  $\left\langle [S_{\mathbf{q}\alpha}^+, S_{\mathbf{q}\beta}^-]_- \right\rangle$  ist entsprechend der Forderung nach Rotationsinvarianz zu verfügen. Dazu wird er einer Fourier-Transformation unterzogen. Es gilt zunächst

$$\left\langle [S_{\mathbf{q}\alpha}^+, S_{\mathbf{q}\beta}^-]_- \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{R}_{n\beta})) \underbrace{\left\langle [S_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- \right\rangle}_{2\delta_{m\alpha, n\beta} \langle S_{m\alpha}^z \rangle}.$$

---

<sup>7</sup>Bei der Behandlung des zweidimensionalen Kagomé-Gitters in [28, 29] benutzen die Autoren das geometrische Gitter, obwohl kein klassischer Ordnungsvektor eindeutig definierbar ist. Die Situation ähnelt damit der in der entsprechenden LSWT. Was mit Widerspruchsfreiheit gemeint ist, wird in Abschnitt 3.2.5 verdeutlicht.

Da aber der thermodynamische Erwartungswert  $\langle S_{m\alpha}^z \rangle$  für jeden Spin verschwinden soll, erhält man  $\langle [S_{q\alpha}^+, S_{q\beta}^-]_- \rangle = 0$ . Somit reduziert sich (3.4) unter Beachtung der Bewegungsgleichung für Operatoren im Heisenberg-Bild  $i\dot{A} = [A, H]_-$  auf

$$\omega \langle \langle S_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega = \langle \langle i\dot{S}_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (3.5)$$

Auf der rechten Seite taucht eine Greensche Funktion höherer Ordnung auf, deren Bewegungsgleichung ebenfalls berücksichtigt wird. Sie ist durch

$$\omega \langle \langle i\dot{S}_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega = \left\langle \left[ i\dot{S}_{q\alpha}^+, S_{q\beta}^- \right]_- \right\rangle + \langle \langle -\ddot{S}_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega \quad (3.6)$$

gegeben, wobei es sich bei  $\langle \langle -\ddot{S}_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega$  um eine weitere Greensche Funktion höherer Ordnung handelt, für die bekanntermaßen wiederum eine Bewegungsgleichung aufzustellen wäre. Die sich abzeichnende Hierarchie einer unendlichen Folge Greenscher Funktionen immer höherer Ordnung soll aber mit (3.6) entsprechend den Darlegungen am Anfang abgebrochen werden. Dies gelingt durch geeignete Entkopplungsstrategien im Rahmen einer näherungsweisen Behandlung des Operators  $-\ddot{S}_{q\alpha}^+$ . Zunächst liefert das Einsetzen von (3.5) in (3.6)

$$\omega^2 \langle \langle S_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega = \left\langle \left[ i\dot{S}_{q\alpha}^+, S_{q\beta}^- \right]_- \right\rangle + \langle \langle -\ddot{S}_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega. \quad (3.7)$$

Diese Gleichung wird durch das Entkoppeln linearisiert. Im Ergebnis erhält man einen genäherten Ausdruck für  $\langle \langle S_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega$ , woraus über das Spektraltheorem  $\langle S_{q\beta}^- S_{q\alpha}^+ \rangle$  folgt. Durch die Entkopplungsprozedur ist  $\langle \langle S_{q\alpha}^+; S_{q\beta}^- \rangle \rangle_\omega$  selbst eine Funktion einer Reihe von Erwartungswerten des Typs  $\langle S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+ \rangle$ .

### 3.2.1 Die Momentenmatrix

Der Term  $\left\langle \left[ i\dot{S}_{q\alpha}^+, S_{q\beta}^- \right]_- \right\rangle$  in (3.7) stellt ein Element der Momentenmatrix  $M_q$  mit

$$M_{q\alpha\beta} = \left\langle \left[ i\dot{S}_{q\alpha}^+, S_{q\beta}^- \right]_- \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{m,n} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{R}_{n\beta})) \left\langle \left[ i\dot{S}_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^- \right]_- \right\rangle$$

nach der Fourier-Transformation (3.3) dar. Wegen  $i\dot{S}_{m\alpha}^+ = [S_{m\alpha}^+, H]_-$  interessiert zuerst der Kommutator

$$\begin{aligned} [S_{m\alpha}^+, H]_- &= \frac{1}{2} \sum_{l\gamma, n\beta} J_{l\gamma, n\beta} \left( S_{l\gamma}^z [S_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^z]_- + [S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^z]_- S_{n\beta}^z \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} S_{l\gamma}^+ [S_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- + \frac{1}{2} [S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^-]_- S_{n\beta}^+ \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha, n\beta} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^z) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{l\gamma} J_{l\gamma, m\alpha} (S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^z - S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+). \end{aligned}$$

Der letzte Ausdruck kann weiter zusammengefaßt werden. Es ist zunächst leicht einzusehen, daß in

$$\sum_{l\gamma} J_{l\gamma,m\alpha} (S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^z - S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+)$$

der Index  $l\gamma$  durch  $n\beta$  ersetzt werden kann, woraus mit  $J_{m\alpha,n\beta} = J_{n\beta,m\alpha}$

$$[S_{m\alpha}^+, H]_- = \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^z + S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^z - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+)$$

folgt. Auch diese Beziehung ist noch kompakter formulierbar, denn wegen  $J_{m\alpha,n\beta} = J_{m\alpha,n\beta} (1 - \delta_{m\alpha,n\beta})$  können die nötigen Vertauschungen vorgenommen werden, die letztendlich auf

$$i\dot{S}_{m\alpha}^+ = [S_{m\alpha}^+, H]_- = \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+ - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+) \quad (3.8)$$

führen. Somit kann nun die Berechnung des Kommutators

$$[i\dot{S}_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- = \sum_{l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} ([S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+, S_{n\beta}^-]_- - [S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_-)$$

erfolgen. Man findet nach einigen Umformungen

$$[i\dot{S}_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- = J_{m\alpha,n\beta} (2S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z + S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+) - \delta_{m\alpha,n\beta} \sum_{l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} (2S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^z + S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+)$$

oder

$$\begin{aligned} \left\langle [i\dot{S}_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- \right\rangle &= J_{m\alpha,n\beta} (2 \langle S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z \rangle + \langle S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+ \rangle) \\ &\quad - \delta_{m\alpha,n\beta} \sum_{l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} (2 \langle S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^z \rangle + \langle S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ \rangle). \end{aligned}$$

Aufgrund der Rotationsinvarianz gelten für die Erwartungswerte vom Typ  $\langle S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z \rangle$  sowie  $\langle S_{m\alpha}^\pm S_{n\beta}^\mp \rangle$ , die von nun an als Korrelatoren bezeichnet werden, folgende Relationen:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_{m\alpha} \mathbf{S}_{n\beta} \rangle &= 3 \langle S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z \rangle = \langle S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z \rangle + (\langle S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^- \rangle + \langle S_{m\alpha}^- S_{n\beta}^+ \rangle) / 2, \\ \langle S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^- \rangle &= \langle S_{m\alpha}^- S_{n\beta}^+ \rangle = c_{m\alpha,n\beta} = c_{m\alpha,n\beta}^* = c_{n\beta,m\alpha}, \end{aligned}$$

woraus neben  $\langle \mathbf{S}_{m\alpha} \mathbf{S}_{n\beta} \rangle = 3c_{m\alpha,n\beta}/2$  auch

$$\left\langle [i\dot{S}_{m\alpha}^+, S_{n\beta}^-]_- \right\rangle = 2J_{m\alpha,n\beta}c_{m\alpha,n\beta} - 2\delta_{m\alpha,n\beta} \sum_{l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma}c_{m\alpha,l\gamma}$$

folgt. Zum Schluß sind es unter anderem diese Korrelatoren, für die selbstkonsistent zu lösende Gleichungen aufgestellt werden müssen. Beim Entkoppeln kommen weitere Korrelatoren hinzu.

Um endgültig zur Momentenmatrix zu gelangen, ist die letzte Gleichung einer Fourier-Transformation zu unterwerfen:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{q}\alpha\beta} &= \frac{2}{N} \sum_{m,n} J_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{R}_{n\beta})) \\ &- \frac{2}{N} \sum_{m,n} \sum_{l\gamma} \delta_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{R}_{n\beta})). \end{aligned}$$

Mit  $\delta_{m\alpha,n\beta} = \delta_{\alpha,\beta} \delta_{m,n}$  lässt sich der letzte Summand weiter vereinfachen. Durchführen der entsprechenden Operationen liefert

$$\delta_{\alpha,\beta} \sum_m \sum_{l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{R}_{m\beta})).$$

Falls  $\alpha = \beta$  gilt, wird der Exponent in der Summe Null. Ist im Gegensatz dazu  $\alpha \neq \beta$ , so wird der ganze Term selbst Null. Man kann also die Momentenmatrix in kompakter Gestalt mit  $\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta} = \mathbf{R}_{n\beta} - \mathbf{R}_{m\alpha}$  auch wie folgt aufschreiben:

$$M_{\mathbf{q}\alpha\beta} = \frac{2}{N} \sum_{m,n} J_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) - \frac{2}{N} \delta_{\alpha,\beta} \sum_{m,l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma}. \quad (3.9)$$

### 3.2.2 Die Frequenzmatrix

Es verbleibt damit die Untersuchung des Operators  $-\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+$  aus (3.7). Dazu muß der Kommutator  $[i\dot{S}_{m\alpha}^+, H]_-$  studiert werden. Unter Verwendung von (3.8) ergibt sich zunächst

$$\begin{aligned} -\ddot{S}_{m\alpha}^+ &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma,k\delta} J_{m\alpha,n\beta} J_{l\gamma,k\delta} \left( [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^z S_{k\delta}^z]_- - [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^z S_{k\delta}^z]_- \right. \\ &+ \frac{1}{2} [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^+ S_{k\delta}^-]_- - \frac{1}{2} [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^+ S_{k\delta}^-]_- \\ &\left. + \frac{1}{2} [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^- S_{k\delta}^+]_- - \frac{1}{2} [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^- S_{k\delta}^+]_- \right). \end{aligned}$$

Die einzelnen Term werden gliedweise behandelt. Durch Ausnutzen von  $[S_{m\alpha}^z, S_{n\beta}^\pm]_- = \pm S_{m\alpha}^\pm \delta_{m\alpha,n\beta}$  mit  $J_{m\alpha,n\beta} = J_{n\beta,m\alpha} = J_{m\alpha,n\beta} (1 - \delta_{m\alpha,n\beta})$  und geeignete Manipulation der Summenindizes erhält man

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma,k\delta} J_{m\alpha,n\beta} J_{l\gamma,k\delta} [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^z S_{k\delta}^z]_- &= - \sum_{n\beta,l\gamma} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^z S_{n\beta}^+, \\ -\frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma,k\delta} J_{m\alpha,n\beta} J_{l\gamma,k\delta} [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^z S_{k\delta}^z]_- &= \sum_{n\beta,l\gamma} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+, \\ \frac{1}{4} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma,k\delta} J_{m\alpha,n\beta} J_{l\gamma,k\delta} [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^+ S_{k\delta}^-]_- &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta,l\gamma} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^+, \\ +\frac{1}{4} \sum_{n\beta,l\gamma} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} S_{l\gamma}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ &- \frac{1}{4} \sum_{n\beta,l\gamma} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ S_{n\beta}^+, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{4} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma, k\delta} J_{m\alpha, n\beta} J_{l\gamma, k\delta} [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^+ S_{k\delta}^-]_- &= -\frac{1}{2} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+ \\
+\frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} S_{n\beta}^- S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^+ &- \frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} S_{l\gamma}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+, \\
\frac{1}{4} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma, k\delta} J_{m\alpha, n\beta} J_{l\gamma, k\delta} [S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+, S_{l\gamma}^- S_{k\delta}^+]_- &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^+ \\
+\frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} S_{l\gamma}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ &- \frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ S_{n\beta}^+, \\
-\frac{1}{4} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma, k\delta} J_{m\alpha, n\beta} J_{l\gamma, k\delta} [S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+, S_{l\gamma}^- S_{k\delta}^+]_- &= -\frac{1}{2} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+ \\
+\frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} S_{n\beta}^- S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^+ &- \frac{1}{4} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} S_{l\gamma}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+.
\end{aligned}$$

All diese Terme werden nun zu

$$\begin{aligned}
-\ddot{S}_{m\alpha}^+ &= \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} (S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} (S_{l\gamma}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ S_{n\beta}^+) \\
&+ \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^+ - S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^z S_{n\beta}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta, l\gamma} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} (S_{n\beta}^- S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^+ - S_{l\gamma}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+)
\end{aligned}$$

zusammengefaßt. Diejenigen Terme, die zwei Spinoperatoren mit identischen Indizes enthalten, sind abzuspalten:

$$\begin{aligned}
-\ddot{S}_{m\alpha}^+ &= \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} (S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+) \\
&+ \sum_{n\beta} J_{m\alpha, n\beta}^2 (S_{n\beta}^z S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha, n\beta} J_{m\alpha, l\gamma} (S_{l\gamma}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ S_{n\beta}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha, n\beta}^2 (S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^- S_{n\beta}^+ S_{n\beta}^+) \\
&+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^+ - S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^z S_{n\beta}^+) \\
&+ \sum_{n\beta} J_{m\alpha, n\beta}^2 (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^+ - S_{m\alpha}^z S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha, n\beta} J_{n\beta, l\gamma} (S_{n\beta}^- S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^+ - S_{l\gamma}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha, n\beta}^2 (S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+ S_{m\alpha}^+ - S_{m\alpha}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+).
\end{aligned}$$

Bei der Behandlung der Anteile mit gleichen Indizes kommt die Eigenschaft zum Tragen, daß es sich um Spins  $s = 1/2$  handeln soll, so daß folgende Relationen gelten:

$$S^+ S^+ = 0, \quad S^z S^z = 1/4, \quad S^z = 1/2 - S^- S^+.$$

Aus der letzten Gleichung  $S^z = 1/2 - S^- S^+$  erhält man mit  $\langle S^z \rangle = 0$  die Summenregel  $\langle S^- S^+ \rangle = 1/2$ . Sodann folgt unter Berücksichtigung dieser Relationen

$$\begin{aligned} -\ddot{S}_{m\alpha}^+ &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 (S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^+) \\ &+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} (S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^z S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^z S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^+) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} (S_{l\gamma}^- S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^+ - S_{m\alpha}^- S_{l\gamma}^+ S_{n\beta}^+) \\ &+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} (S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z S_{l\gamma}^+ - S_{m\alpha}^z S_{l\gamma}^z S_{n\beta}^+) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} (S_{n\beta}^- S_{l\gamma}^+ S_{m\alpha}^+ - S_{l\gamma}^- S_{n\beta}^+ S_{m\alpha}^+). \end{aligned}$$

An dieser Stelle werden die Operatorprodukte gemäß

$$\begin{aligned} S_A^- S_B^+ S_C^+ &\rightarrow \eta_{A,B} \langle S_A^- S_B^+ \rangle S_C^+ + \eta_{A,C} \langle S_A^- S_C^+ \rangle S_B^+ = \eta_{A,B} c_{A,B} S_C^+ + \eta_{A,C} c_{A,C} S_B^+, \\ S_A^z S_B^z S_C^+ &\rightarrow \eta_{A,B} \langle S_A^z S_B^z \rangle S_C^+ = \eta_{A,B} c_{A,B} S_C^+/2 \end{aligned}$$

entkoppelt und durch Korrelatoren ersetzt [78, 80]. Erwartungswerte der Form  $\langle S^+ S^+ \rangle$  oder  $\langle S^z S^+ \rangle$  verschwinden aufgrund der Tatsache, daß die  $z$ -Komponente des Gesamtspins mit dem Hamilton-Operator (3.1) vertauscht. Den Fehler, den man beim Entkoppeln unvermeidlich macht, gleichen Vertexpараметer  $\eta$  zum Teil aus. Sie sichern die Gültigkeit der Summenregel und gewährleisten gegebenenfalls die Eindeutigkeit der uniformen statischen Suszeptibilität als Meßgröße<sup>8</sup>. Im Rahmen dieser Näherung ergibt sich

$$\begin{aligned} -\ddot{S}_{m\alpha}^+ &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 (S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^+) \\ &+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} (\eta_{n\beta,l\gamma} c_{n\beta,l\gamma} S_{m\alpha}^+ - \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} S_{l\gamma}^+) \\ &+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} (\eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} S_{l\gamma}^+ - \eta_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} S_{n\beta}^+), \end{aligned}$$

wobei zuvor einige Vertauschungen im Interesse einer größeren Übersichtlichkeit vorgenommen wurden. Um von  $-\ddot{S}_{m\alpha}^+$  nach  $-\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+$  zu gelangen, ist obige Beziehung entsprechend (3.3) wie

$$-\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+ = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m -\ddot{S}_{m\alpha}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha})$$

---

<sup>8</sup>Diese Forderung hängt mit der Isotropie der Greenschen Funktionen im Punkt  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  zusammen. Siehe dazu Abschnitt 3.3.

gliedweise zu transformieren. Wendet man sich zunächst dem Beitrag  $\frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 (S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^+)$  zu, dann gilt

$$\begin{aligned}
& \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 (S_{m\alpha}^+ - S_{n\beta}^+) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_m J_{m\alpha,n\beta}^2 \frac{S_{m\alpha}^+}{\sqrt{N}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_m \sum_{\mathbf{q}'} J_{m\alpha,n\beta}^2 \frac{S_{\mathbf{q}'\beta}^+}{N} \exp(i(\mathbf{q}'\mathbf{R}_{n\beta} - \mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha})) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 \sum_m \frac{S_{m\alpha}^+}{\sqrt{N}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{n\beta} \sum_{\mathbf{q}'} \frac{S_{\mathbf{q}'\beta}^+}{N} J_{m\alpha,n\beta}^2 \exp(i\mathbf{q}'\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) \sum_m \exp(i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}(\mathbf{q}' - \mathbf{q})) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 S_{\mathbf{q}\alpha}^+ - \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) S_{\mathbf{q}\beta}^+
\end{aligned}$$

mit  $\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta} = \mathbf{R}_{n\beta} - \mathbf{R}_{m\alpha}$ . Das Ausführen der Summationen über  $m$  in dieser Form mit dem Vorziehen der Faktoren  $J_{m\alpha,n\beta}^2$  bzw.  $J_{m\alpha,n\beta}^2 \exp(i\mathbf{q}'\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta})$  ist möglich, weil der Hamilton-Operator selbstverständlich translationssymmetrisch ist. Genauso findet man

$$\begin{aligned}
& \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{n\beta,l\gamma} c_{n\beta,l\gamma} S_{m\alpha}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&= \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{n\beta,l\gamma} c_{n\beta,l\gamma} S_{\mathbf{q}\alpha}^+, \\
&\quad \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} S_{l\gamma}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&= \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,l\gamma}) S_{\mathbf{q}\gamma}^+, \\
&\quad \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} S_{l\gamma}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&= \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,l\gamma}) S_{\mathbf{q}\gamma}^+, \\
&\quad \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_m \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} S_{n\beta}^+ \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{R}_{m\alpha}) \\
&= \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) S_{\mathbf{q}\beta}^+
\end{aligned}$$

wiederum mit  $\mathbf{r}_{m\alpha,l\gamma} = \mathbf{R}_{l\gamma} - \mathbf{R}_{m\alpha}$ . In endgültiger Gestalt gewinnt man, indem alle Beiträge mit entsprechendem Vorzeichen aufsummiert werden,

$$\begin{aligned}
-\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+ &= \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 S_{\mathbf{q}\alpha}^+ - \frac{1}{2} \sum_{n\beta} J_{m\alpha,n\beta}^2 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) S_{\mathbf{q}\beta}^+ \\
&+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{n\beta,l\gamma} c_{n\beta,l\gamma} S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \\
&- \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq n\beta} J_{m\alpha,n\beta} J_{m\alpha,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,l\gamma}) S_{\mathbf{q}\gamma}^+ \\
&+ \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,l\gamma}) S_{\mathbf{q}\gamma}^+ \\
&- \sum_{n\beta} \sum_{l\gamma \neq m\alpha} J_{m\alpha,n\beta} J_{n\beta,l\gamma} \eta_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) S_{\mathbf{q}\beta}^+. \quad (3.10)
\end{aligned}$$

Durch das Entkoppeln ist offensichtlich die ursprüngliche Bewegungsgleichung (3.7) linearisiert worden, denn aus  $-\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+ = \sum_{\gamma} F_{\mathbf{q}\alpha\gamma} S_{\mathbf{q}\gamma}^+$  folgt

$$\langle\langle -\ddot{S}_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_{\omega} = \sum_{\gamma} F_{\mathbf{q}\alpha\gamma} \langle\langle S_{\mathbf{q}\gamma}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_{\omega},$$

wobei  $F_{\mathbf{q}}$  als Frequenzmatrix bezeichnet wird, deren Matrixelemente aus (3.10) zu bestimmen sind, so daß ein lineares Gleichungssystem in Matrixform für einen Satz Greenscher Funktionen entsteht, das durch

$$\sum_{\gamma} (F_{\mathbf{q}\alpha\gamma} - \omega^2 \delta_{\alpha\gamma}) \langle\langle S_{\mathbf{q}\gamma}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_{\omega} = -M_{\mathbf{q}\alpha\gamma} \quad (3.11)$$

gegeben ist. Bei  $n$  Spins pro Elementarzelle handelt es sich um  $n \times n$ -Matrizen. Ausgehend von der Kramerschen Regel, findet man über die Eigenwerte der Frequenzmatrix die Pole der Greenschen Funktionen. Sie entsprechen den Dispersionsrelationen in der Spinwellentheorie.

### 3.2.3 Korrelationsfunktionen

Zur Berechnung der gesuchten Korrelatoren wird das Spektraltheorem herangezogen. Wegen

$$\langle S_{n\beta}^- S_{m\alpha}^+ \rangle = c_{m\alpha,n\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}'\alpha}^+ \rangle \exp(i(\mathbf{q}/\mathbf{R}_{m\alpha} - \mathbf{q}/\mathbf{R}_{n\beta}))$$

gewinnt man nach Summierung dieser Gleichung über alle Gitterplätze  $m$  unter Ausnutzung der Translationssymmetrie

$$c_{m\alpha,n\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}),$$

woran besagtes Spektraltheorem mit  $\langle\langle S_{\mathbf{q}\alpha}^+; S_{\mathbf{q}\beta}^- \rangle\rangle_{\omega} \equiv G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)$  gemäß

$$\langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega + i\epsilon) - G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega - i\epsilon)}{\exp(\omega/kT) - 1} d\omega$$

anknüpfen kann. Praktisch zerlegt man  $G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)$  in einzelne Partialbrüche

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) &= g_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) / \prod_m (\omega^2 - \omega_{m\mathbf{q}}^2) \\ &= \sum_m \frac{A_{m\mathbf{q}\alpha\beta}}{\omega - \omega_{m\mathbf{q}}} - \frac{B_{m\mathbf{q}\alpha\beta}}{\omega + \omega_{m\mathbf{q}}}, \end{aligned}$$

woraus sich wegen  $G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) = G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(-\omega)$  als Lösung von (3.11)

$$A_{m\mathbf{q}\alpha\beta} = B_{m\mathbf{q}\alpha\beta} = g_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega_{m\mathbf{q}}) / 2\omega_{m\mathbf{q}} \prod_{n \neq m} (\omega_{m\mathbf{q}}^2 - \omega_{n\mathbf{q}}^2) \quad (3.12)$$

ergibt<sup>9</sup>. Alsdann führt die Anwendung der Dirac-Formel (2.46) auf

$$\langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle = c_{\mathbf{q}\alpha\beta} = \sum_m A_{m\mathbf{q}\alpha\beta} (1 + 2n(\omega_{m\mathbf{q}})),$$

wobei  $n(\omega_{m\mathbf{q}}) = 1/(\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1)$  die mittlere Magnonenbesetzungszahl ist, die naturgemäß der Bose-Einstein-Statistik gehorcht. Magnetische Fernordnung äußert sich in der Existenz von Kondensatterminen [80] in

$$c_{m\alpha,n\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{qr}_{m\alpha,n\beta}),$$

die in der Summe entsprechend

$$c_{m\alpha,n\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{qr}_{m\alpha,n\beta}) + \sum_{\mathbf{Q}} C_{\mathbf{Q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{Qr}_{m\alpha,n\beta}) \quad (3.13)$$

abzuspalten sind<sup>10</sup>. Um dies einzusehen, sei auf die formale Analogie zur Bose-Einstein-Kondensation verwiesen<sup>11</sup>. Man spricht im Falle von LRO von Modenkondensation bei  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , wobei  $\mathbf{Q}$  der magnetische Ordnungsvektor ist<sup>12</sup>. Damit verbunden ist die Divergenz der statischen Suszeptibilität  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)$  für  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ . Die Beziehung, die letzteres gewährleistet, bezeichnet man als Kondensatbedingung. In Verallgemeinerung von [80] dienen als Ordnungsparameter die Grenzwerte

$$M_{\alpha\beta}^2 = \lim_{|r_{m\alpha,n\beta}| \rightarrow \infty} |3c_{m\alpha,n\beta}/2|.$$

---

<sup>9</sup>In die Greenschen Funktionen geht  $\omega$  quadratisch ein.

<sup>10</sup>Kondo und Yamaji [78] haben ursprünglich den Ferromagneten auf der linearen Kette untersucht, ohne einen Kondensattermin abzuspalten. Von hohen Temperaturen kommend, haben sie sich dem Nullpunkt genähert. Auf diese Weise ist es ihnen gelungen, auch den Grundzustand richtig zu beschreiben. Das konnte so aber nur deshalb funktionieren, weil bei endlichen Temperaturen keine magnetische Ordnung existiert. Shimahara und Takada [80] haben den Formalismus dahingehend erweitert und den Begriff des Kondensats eingeführt.

<sup>11</sup>Für einfache Fälle lässt sich zudem direkt zeigen, daß der Zusatzterm  $(\eta + 1)C/4\pi$  aus dem allgemeinen Spektraltheorem [39] nur für diejenigen  $\mathbf{q}$  von Null verschieden ist, für die Kondensation auftritt. Er ist dann mit dem Kondensattermin zu identifizieren.

<sup>12</sup>Modenkondensation kann wie beim  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem Quadrat-Gitter bei verschiedenen  $\mathbf{Q}$  gleichzeitig auftreten.

Langreichweitige Ordnung liegt also genau dann vor, wenn zwei unendlich voneinander entfernte Spins noch miteinander korrelieren. Diese Definition bringt die Ordnungsparameter mit den Kondensattermen in Verbindung, denn es folgt

$$M_{\alpha\beta}^2 = \frac{3}{2} \lim_{|r_{m\alpha,n\beta}| \rightarrow \infty} \left| \sum_{\mathbf{Q}} C_{\mathbf{Q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta}) \right|. \quad (3.14)$$

Fallen die Indizes zusammen ( $\alpha = \beta$ ), so handelt es sich bei  $M_{\alpha\alpha}^2$  um das Quadrat der Magnetisierung  $M_\alpha$  in dem durch den Index  $\alpha$  bezeichneten Untergitter. Oftmals stellt sich heraus, daß

$$F_{\mathbf{q}} = F_{\mathbf{q}}^+, \quad M_{\mathbf{q}} = M_{\mathbf{q}}^+, \quad [F_{\mathbf{q}}, M_{\mathbf{q}}]_- = 0$$

erfüllt ist<sup>13</sup>. Dann besitzen die Frequenzmatrix  $F_{\mathbf{q}}$  und die Momentenmatrix  $M_{\mathbf{q}}$  ein gemeinsames, orthogonales System von Eigenvektoren zu reellen Eigenwerten. Mit

$$F_{\mathbf{q}} |j\mathbf{q}\rangle = \omega_{j\mathbf{q}}^2 |j\mathbf{q}\rangle, \quad M_{\mathbf{q}} |j\mathbf{q}\rangle = m_{j\mathbf{q}} |j\mathbf{q}\rangle$$

folgt für die Lösungsmatrix  $G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  aus (3.11)

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) |j\mathbf{q}\rangle = \frac{m_{j\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{j\mathbf{q}}^2} |j\mathbf{q}\rangle$$

bzw. die Zerlegung

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \sum_j G_{j\mathbf{q}}^{+-} |j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}| \quad (3.15)$$

mit den Eigenwerten  $G_{j\mathbf{q}}^{+-} = m_{j\mathbf{q}} / (\omega^2 - \omega_{j\mathbf{q}}^2)$ . Daraus ergibt sich nach Anwendung des Spektraltheorems die Korrelatorenmatrix zu

$$c_{\mathbf{q}} = \sum_j \frac{m_{j\mathbf{q}}}{2\omega_{j\mathbf{q}}} (1 + 2n(\omega_{j\mathbf{q}})) |j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}| \quad (3.16)$$

mit den Matrixelementen

$$c_{\mathbf{q}\alpha\beta} = \sum_j \frac{m_{j\mathbf{q}}}{2\omega_{j\mathbf{q}}} (1 + 2n(\omega_{j\mathbf{q}})) \langle \alpha |j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}| \beta \rangle$$

und

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots$$

für  $\alpha, \beta = 1, 2, 3, \dots$  als Zeilen- respektive Spaltenindizes. Der Vorteil dieser Darstellungsweise offenbart sich in der Praxis bei der Untersuchung von Gittern mit Basis. Es sei an dieser Stelle nochmals betont, daß sich die dynamische Suszeptibilität  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  von  $G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  nur durch das Vorzeichen unterscheidet:  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = -G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$ .

---

<sup>13</sup>Ob dies ein allgemeines Merkmal der Theorie ist oder nur vom betrachteten Modell abhängt, ist bisher nicht untersucht worden.

### 3.2.4 Lösungsstrategie

Wie geht man nun im einzelnen vor? Zuerst untersucht man den klassischen Grundzustand des Modells, um dadurch das magnetische Gitter festlegen zu können. Im magnetischen Gitter ist der ordnungsbeschreibende Vektor<sup>14</sup> stets  $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ . Jetzt ist zu prüfen, ob dieselbe Ordnung auch ausgehend vom geometrischen Gitter unter Einbeziehung eines gegebenenfalls von Null verschiedenen  $\mathbf{Q}$  erhalten werden kann. Wenn dies so ist, dann läßt sich das Problem übersichtlicher gestalten, denn die geometrische Elementarzelle beinhaltet weniger Spins als die magnetische Elementarzelle, falls beide nicht schon identisch sind. Entsprechend der Zahl der Spins in den Zellen sind die beteiligten Matrizen dimensioniert. Alsdann erfolgt die Bestimmung der Matrixelemente aus (3.9) und (3.10) und daraufhin die Lösung der Gleichung (3.11). Mithilfe des Spektraltheorems können jetzt für alle auftretenden Korrelatoren Gleichungen aufgestellt werden. Weitere Gleichungen gewinnt man aus den Summenregeln, deren Zahl der der Spins in der Elementarzelle entspricht. Falls die Spins innerhalb einer Elementarzelle bezüglich ihrer Umgebung, d.h. konkret bezüglich ihrer Kopplung mit umgebenden Spins, als gleichwertig zu betrachten sind, so reduziert sich die Zahl der zu berücksichtigenden Summenregeln<sup>15</sup>. Bei räumlicher Anisotropie der Kopplungen ist der Grenzwert  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  nicht eindeutig. Seine Eindeutigkeit ist aber zu fordern<sup>16</sup>, woraus man zusammen mit den Summenregeln Gleichungen zur Bestimmung der Vertexparameter erhält. Liegt langreichweitige Ordnung tatsächlich vor, so existieren von Null verschiedene Kondensatterme. Dann ist zusätzlich die Kondensatbedingung zu erfüllen. In einer Minimalversion der RGM werden genauso viele Vertexparameter eingeführt, wie sich unabhängige Gleichungen formulieren lassen. Man halte sich dazu Tab. 3.1 vor Augen. In der Regel übersteigt die Zahl der zu unterscheidenden Vertexparameter die Zahl der zu ihrer Bestimmung vorliegenden Gleichungen. Mit den überzähligen Vertexparametern ist deshalb in geeigneter Weise zu verfahren. Dabei ist das Gleichsetzen von Vertexparametern eine naheliegende Variante<sup>17</sup>. Vertexparameter lassen sich auch per Hand zueinander in Beziehung setzen, so daß bestimmte Grenzfälle<sup>18</sup> konsistent enthalten sind. Darüber hinaus ist der Abgleich mit anderen Theorien möglich, womit die Vertexparameter zur Optimierung der Resultate herangezogen werden können. Mit der Einführung von Vertexparametern ist eine gewisse Willkür verbunden. So kann z.B. zu großzügiges Gleichsetzen von  $\eta$ , die zu verschiedenen, sich vielleicht noch durch das Vorzeichen unterscheidenden Korrelatoren gehören, bei komplizierteren Systemen dazu führen, daß in bestimmten Parameterregionen Unstetigkeiten auftreten [84], daß überhaupt keine Lösungen oder aber gleich mehrere Lösungen existieren<sup>19</sup>. Immerhin

---

<sup>14</sup>Dies gilt, falls man überhaupt von klassischer Ordnung reden kann. Man denke dabei an das zweidimensionale Kagomé-Gitter, dessen klassischer Grundzustand für  $J > 0$  hochgradig entartet ist.

<sup>15</sup>Wenn alle Spins in einer Zelle in diesem Sinne äquivalent sind, dann erfüllt die Lösung des Gleichungssystems alle Summenregeln simultan.

<sup>16</sup>Die physikalische Forderung besteht bei Gittern mit Basis, wo zusätzlich die Frequenz- mit der Momentenmatrix vertauscht und die der Autor studiert hat, darin, daß die uniforme statische Suszeptibilität  $\chi$  als Meßgröße in der Theorie als Eigenwert der Matrix  $-\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)/2$  in der Grenze  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  eindeutig zu sein hat.

<sup>17</sup>Natürlich darf das Gleichsetzen nicht in der Form geschehen, daß danach weniger Parameter als Gleichungen vorliegen.

<sup>18</sup>Für das  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem Quadrat-Gitter ist das in [31, 82] dargestellt.

<sup>19</sup>Die beiden letzten Szenarien treten im Anschluß beim geschichteten Kagomé-Gitter auf.

handelt es sich um hochgradig nichtlineare Gleichungen. Umso mehr kommt es dann auf zusätzliche Informationen von außen an, um möglichst viele Vertexparameter als Unbekannte behandeln zu können, die sich zum Schluß zusammen mit den Korrelatoren als Lösung des Gleichungssystems selbstkonsistent ergeben. Meistens lassen sich derartige Probleme damit beheben. Wie sich aber zeigen läßt, ist man bei der Wahl geeigneten Inputs jedoch nicht vollkommen frei [81]. Anhand eines Beispiels im Anhang A.2 soll dies kurz demonstriert werden. In dieser Arbeit steht dagegen der formale Aspekt der RGM im Vordergrund. Daher soll sich auf die oben erwähnte Minimalversion beschränkt werden, womit die soeben erwähnten Schwierigkeiten einzukalkulieren sind.

Jetzt kann man bei genügend hohen Temperaturen starten und eine Lösung suchen. Genau dann weiß man, daß unabhängig davon, ob bei tieferen Temperaturen langreichweitere Ordnung einsetzt oder nicht, keine Kondensatterme zu berücksichtigen sind, da thermische Fluktuationen letztendlich jegliche Ordnung längst zerstört haben. Eine typische Lösung in diesem Temperaturbereich enthält betragsmäßig kleine Korrelatoren und Vertexparameter nahe der Eins, was auch so sein sollte, da die Entkopplung ohne Vertexparameter ( $\eta = 1$ ) genau dann die Realität gut beschreibt, wenn thermische Fluktuationen im Spinsystem dominieren. Systematisch wird anschließend die Temperatur bis zu jenem Punkt verringert, bei dem das Gleichungssystem ohne Kondensat keine Lösung mehr besitzt. Unterhalb dieser Temperatur ist das Spinsystem magnetisch ungeordnet, und man hat unter Einbeziehung der entsprechenden Kondensate zu rechnen. Zuvor hat man sich zu vergewissern, bei welchen  $\mathbf{Q}$  Modenkondensation auftritt. Entscheidend dafür ist die Tatsache, daß die statische Suszeptibilität  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  bzw.  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  für genau diese  $\mathbf{Q}$  divergiert<sup>20</sup>. Die Divergenz manifestiert sich beispielsweise darin, daß sich im Spektrum  $\omega_{m\mathbf{q}}$  bei  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  Lücken schließen oder insbesondere bei ferromagnetischen Kopplungen ( $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ ) ein qualitativer Umschlag von  $\omega_{m\mathbf{q}} \sim q$  auf  $\omega_{m\mathbf{q}} \sim q^2$  erfolgt. Die Kondensatterme sind von nun an weitere unbekannte Parameter. Als zusätzliche Gleichungen dienen dann neben der Kondensatbedingung bestimmte Relationen zwischen den Kondensattermen, auf die im Anschluß anhand eines Beispiels eingegangen wird.

Es ist aber auch möglich, daß bis zu  $T = 0$  herunter Lösungen ohne Kondensat existieren. In diesen Fällen bleibt das betrachtete Spinsystem bis in den Grundzustand hinein ungeordnet. An dieser Stelle ist der Hinweis nicht unwesentlich, daß die RGM das Mermin-Wagner-Theorem [35] nicht verletzt<sup>21</sup>. Man braucht also in entsprechend dimensionierten Systemen gar nicht erst nach Fernordnung zu suchen.

Eine andere Lösungsstrategie geht vom Grundzustand aus. Nachdem man den klassischen Ordnungsvektor bestimmt hat, leitet man die Kondensatbedingung ab und fügt diese in die Dispersionsrelationen ein. Führt dieses Vorgehen zu divergierenden Integralen<sup>22</sup>, dann ist sofort klar, daß der Grundzustand quantenungeordnet ist. Im Umkehrschluß folgt aus der Existenz der Integrale die Existenz von Kondensattermen und daraus die Existenz von magnetischer Fernordnung im Grundzustand. Trifft letzteres zu, so hat man bei endlichen Temperaturen unter Beachtung des Mermin-Wagner-

---

<sup>20</sup>In den überwiegenden Fällen entsprechen diese  $\mathbf{Q}$  den klassischen Ordnungsvektoren.

<sup>21</sup>In der Tatsache, daß in niedrigdimensionalen Systemen die beteiligten Integrale über die Brillouin-Zone unter der Annahme, daß Fernordnung existiert, divergieren, offenbart sich dessen Gültigkeit innerhalb der RGM.

<sup>22</sup>Damit sind z.B. Integrale mit offensichtlich logarithmischen Divergenzen gemeint.

Theorems solange nach Lösungen mit Kondensat zu suchen, bis die Kondensatterme selbst bei einer bestimmten Temperatur Null werden.

	$\exists$ Fernordnung	$\nexists$ Fernordnung
Unbekannte	$c_{m\alpha,n\beta}, \eta, C_{Q\alpha\beta}$	$c_{m\alpha,n\beta}, \eta$
Gleichungen	selbstkonsistente Gleichungen für $c_{m\alpha,n\beta}$ , Summenregel, ggf. Isotropieforderung, Kondensatbedingung, Relationen zwischen $C_{Q\alpha\beta}$	selbstkonsistente Gleichungen für $c_{m\alpha,n\beta}$ , Summenregel, ggf. Isotropieforderung

Tabelle 3.1: Eine Übersicht zu der Frage, welche Unbekannten tauchen in welchem Fall auf, und welche Gleichungen stehen zu ihrer selbstkonsistenten Bestimmung zur Verfügung. Diese Darstellung betrifft die Minimalversion der RGM, in die kein Input von außen eingeht.

### 3.2.5 Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für die lineare Kette

Ein sehr illustratives Beispiel ist das der linearen Kette mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung nicht zuletzt deswegen, weil die lineare Kette später als Grenzfall im Modell des geschichteten Kagomé-Gitters enthalten ist. Hinzu kommt, daß das ursprüngliche Ergebnis von Kondo und Yamaji [78] unter Verwendung einer größeren Elementarzelle reproduziert werden soll. Auf diese Weise wird ein Gitter mit Basis simuliert; unter diesem methodischen Aspekt ist die folgende Rechnung neuartig. Hier wird sich zeigen, wie der Formalismus auf Gitter mit Basis zu erweitern ist. Es seien  $N$  Spins  $s = 1/2$  mit gleichem Abstand eins entlang einer Kette vorgegeben. Die Wechselwirkung wird durch einen Hamilton-Operator vom Typ (3.1) beschrieben. Dabei sei nur die Kopplung zwischen nächstbenachbarten Spins von Null verschieden. Diese Kopplung sei  $J$ . Dann befindet sich nur ein Spin in jeder geometrischen Elementarzelle, deren Basisvektor  $\mathbf{a}_1 = (1)$  ist. Untersucht wird jetzt der klassische Grundzustand. Für  $J < 0$  sind alle Spins parallel. Die magnetische Elementarzelle ist mit der geometrischen Elementarzelle identisch, und der magnetische Ordnungsvektor ist  $\mathbf{Q} = (0)$ . Mit  $J > 0$  wird die Energie trivialerweise dann minimal, wenn alle nächstbenachbarten Spins entlang der Kette paarweise antiparallel ausgerichtet sind. Dann ist die magnetische Elementarzelle mit  $\mathbf{Q} = (0)$  doppelt so groß wie die geometrische. Vom geometrischen Gitter ausgehend, könnte man die magnetische Ordnung für  $J > 0$  auch durch  $\mathbf{Q} = (\pi)$  erfassen. Demzufolge würde für alle  $J$  das geometrische Gitter mit einem Spin pro Zelle als Ausgangspunkt der weiteren Rechnung genügen. Falls Fernordnung überhaupt auftritt - und diese Frage soll zunächst ungetacht einschlägiger Theoreme offen bleiben -, so wäre Kondensation für  $J < 0$  bei  $\mathbf{Q} = (0)$  und für  $J > 0$  bei  $\mathbf{Q} = (\pi)$  zu erwarten. Auf die Vereinfachung, was die Gitterwahl betrifft, wird jedoch bewußt verzichtet, denn die lineare Kette soll als Gitter mit Basis aufgefaßt werden.

Ausgangspunkt der nun folgenden Ableitungen ist das magnetische Gitter des klassischen Antiferromagneten mit zwei Spins pro Zelle, von denen es bei  $N$  Spins  $N/2$  gibt. Mit der Wahl einer größeren Zelle für  $J < 0$  macht man sowieso nichts falsch. Wichtig ist nur, daß dadurch beide Ordnungsvektoren sowohl für  $J < 0$  als auch für  $J > 0$  mit  $\mathbf{Q} = (0)$  zusammenfallen. Unter Benutzung von (3.9) erfolgt nun die Berechnung der Matrixelemente<sup>23</sup> von  $M_{\mathbf{q}}$ :

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{q}11} &= -2J(c_{12}(\mathbf{a}_1) + c_{12}(-\mathbf{a}_1)), \\ M_{\mathbf{q}12} &= 2J(c_{12}(\mathbf{a}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_1) + c_{12}(-\mathbf{a}_1) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{a}_1)), \\ M_{\mathbf{q}21} &= 2J(c_{21}(\mathbf{a}_1) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{a}_1) + c_{21}(-\mathbf{a}_1) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{a}_1)), \\ M_{\mathbf{q}22} &= -2J(c_{21}(\mathbf{a}_1) + c_{21}(-\mathbf{a}_1)). \end{aligned}$$

Es ist leicht einzusehen, daß alle diese Korrelatoren aus Symmetriewägungen heraus gleich sein sollten. Natürlich ist klar, daß bei komplizierteren Systemen Vorsicht geboten ist, denn (3.11) ist nunmehr im Prinzip überbestimmt. Mit  $c_{12}(\mathbf{a}_1) \equiv c_1$  folgt

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{q}11} &= M_{\mathbf{q}22} = -4Jc_1, \\ M_{\mathbf{q}12} &= M_{\mathbf{q}21} = 4Jc_1 \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Beim Aufstellen der Frequenzmatrix  $F_{\mathbf{q}}$  nach (3.10) tauchen neben verschiedenen Vertexparametern, die alle gleichgesetzt werden, Korrelatoren zwischen übernächsten Nachbarn auf. Es sind dies  $c_{11}(2\mathbf{a}_1)$ ,  $c_{11}(-2\mathbf{a}_1)$ ,  $c_{22}(2\mathbf{a}_1)$  sowie  $c_{22}(-2\mathbf{a}_1)$ . Auch sie sollten gleich sein, woraus mit  $c_{11}(2\mathbf{a}_1) \equiv c_2$

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{q}11} &= F_{\mathbf{q}22} = J^2(1 + 2\eta c_2 + 2\eta c_1 \cos(2\mathbf{q}\mathbf{a}_1)), \\ F_{\mathbf{q}12} &= F_{\mathbf{q}21} = -J^2 \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1)(1 + 2\eta c_1 + 2\eta c_2) \end{aligned} \quad (3.18)$$

folgt. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß beide Matrizen vertauschen. Zur Lösung von (3.11) wird diese Eigenschaft ausgenutzt. In der Gestalt von (3.15) erhält man

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{m_{1\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{m_{2\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{2\mathbf{q}}^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

mit

$$\begin{aligned} m_{1\mathbf{q}} &= -4Jc_1(1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1)), \\ \omega_{1\mathbf{q}}^2 &= J^2(1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1))(1 + 2\eta(c_1 + c_2) - 4\eta c_1(1 + \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1))), \\ m_{2\mathbf{q}} &= -4Jc_1(1 + \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1)), \\ \omega_{2\mathbf{q}}^2 &= J^2(1 + \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1))(1 + 2\eta(c_1 + c_2) - 4\eta c_1(1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{a}_1))). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Es wird nun unterstellt, daß Fernordnung in beiden Fällen existiert. Dazu ist zunächst  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  im Limes  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  zu untersuchen. Man findet

$$\begin{aligned} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) &= \frac{2c_1}{J(1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2)} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \\ &+ \frac{2c_1}{J(1 + 2\eta c_1 + 2\eta c_2)} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

---

<sup>23</sup>Die Korrelatoren  $c_{m\alpha,n\beta}$  werden durch  $c_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_{m\alpha,n\beta})$  ersetzt.

Auf diese Weise hat man die vermeintlichen Kondensatbedingungen - die Frage, ob sie überhaupt erfüllbar sind, sei vorerst zurückgestellt - gewonnen. Unter Beachtung der Vorzeichenverhältnisse<sup>24</sup> liefert der Eigenwert

$$G_{1\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{m_{1\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2}$$

mit

$$1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2 = 0 \quad (3.22)$$

die Kondensatbedingung für  $J < 0$  sowie der Eigenwert

$$G_{2\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{m_{2\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{2\mathbf{q}}^2}$$

mit

$$1 + 2\eta c_1 + 2\eta c_2 = 0 \quad (3.23)$$

die Kondensatbedingung für  $J > 0$ . Es sei an dieser Stelle mit Verweis auf Anhang A.3 bereits angemerkt, daß sich die ferromagnetische Korrelationslänge  $\xi_F$  aus der Entwicklung des Eigenwertes  $G_{1\mathbf{q}}^{+-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{1\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  um  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  zu  $\xi_F^2 = 2\eta c_1 / (1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2)$  ergibt. Entsprechend erhält man die antiferromagnetische Korrelationslänge  $\xi_{AF}$  aus der Entwicklung von  $G_{2\mathbf{q}}^{+-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{2\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  um  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ . Man findet die Beziehung  $\xi_{AF}^2 = -2\eta c_1 / (1 + 2\eta c_1 + 2\eta c_2)$ . Wegen des Mermin-Wagner-Theorems kann Fernordnung bestenfalls im Grundzustand auftreten, auf den sich die Untersuchung der Fälle  $J \leq 0$  beschränken soll.

$J < 0$ : Einsetzen der Kondensatbedingung (3.22) in die Dispersionsrelationen aus (3.20) ergibt mit  $\mathbf{q}\mathbf{a}_1 = q_x$

$$\omega_{1\mathbf{q}} = -2J\sqrt{\eta c_1}(1 - \cos q_x), \quad \omega_{2\mathbf{q}} = -2J\sqrt{\eta c_1}(1 + \cos q_x).$$

Dies wiederum eingesetzt in (3.16) liefert die Korrelatorenmatrix

$$c_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{c_1}{\eta}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

welche offenbar nicht von  $\mathbf{q}$  abhängt, womit die beteiligten Summen/Integrale über die Brillouin-Zone auf alle Fälle existieren. Außerdem hängt dann das Ergebnis auch nicht von der Zahl der Gitterplätze/Spins ab. Der ferromagnetische Grundzustand ist langreichweitig geordnet. Im thermodynamischen Limes, bei dem die Summation durch die Integration ersetzt wird, lautet das zu lösende Gleichungssystem dann

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}12} \cos q_x dq_x + C_{12}, \quad c_2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}11} \cos 2q_x dq_x + C_{11}, \\ \frac{1}{2} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}11} dq_x + C_{11}, \quad 1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2 = 0. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Die ersten beiden Gleichungen dienen der selbstkonsistenten Bestimmung der Korrelatoren  $c_1$  und  $c_2$ . Dazu finden die Greenschen Funktionen  $G_{\mathbf{q}12}^{+-}(\omega)$  und  $G_{\mathbf{q}11}^{+-}(\omega)$

---

<sup>24</sup> $\eta > 0$ :  $J > 0 \rightarrow c_1 < 0, c_2 > 0$  sowie  $J < 0 \rightarrow c_1 > 0, c_2 > 0$

Verwendung. Zu jeder Funktion gehört natürlich ein eigener Kondensatterm. Daher ist  $C_{12}$  von  $C_{11}$  zu unterscheiden. Ihren Niederschlag findet die Summenregel in der dritten Gleichung, wobei das eingangs durchgeführte Gleichsetzen gewisser Korrelatoren darüber hinaus keine Widersprüche<sup>25</sup> erzeugt. Das eigentliche Problem, das generell bei Gittern mit Basis auftritt, wenn magnetische Ordnung vorliegt, besteht im Umgang mit den verschiedenen Kondensatterminen; hier gibt es zur Bestimmung von fünf Unbekannten nur vier Gleichungen. Es ist also nach einer weiteren Gleichung zu suchen, die die beiden Kondensatsterme zueinander ins Verhältnis setzt. Der allgemeine Zusammenhang, der dies leistet, lautet: Die Kondensatsterme verhalten sich zueinander wie die entsprechenden statischen Suszeptibilitäten bzw. unter der Annahme, daß die Grenzwertbildung mit der Division vertauschbar ist, gilt

$$\frac{C_{\mathbf{Q}\alpha\beta}}{C_{\mathbf{Q}\gamma\delta}} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{G_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{\chi_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)}. \quad (3.25)$$

Ein Beweis von (3.25) findet sich im Anhang A.1. Hier liefert die Anwendung obiger Beziehung

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} = \frac{1 - 2\eta c_1 + 2\eta c_2}{4\eta c_1}, \quad (3.26)$$

woraus unter Beachtung von (3.22)  $C_{11}/C_{12} = 1$  folgt<sup>26</sup>. Damit stehen jetzt genauso viele Gleichungen widerspruchsfrei zur Verfügung wie Unbekannte vorliegen. Das Gleichungssystem (3.24) hat dann die Gestalt

$$\begin{aligned} c_1 &= C_{12}, & c_2 = C_{11}, & C_{11} = C_{12}, \\ \frac{1}{2} &= \sqrt{\frac{c_1}{\eta}} + C_{11}, & 1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2 = 0, \end{aligned} \quad (3.27)$$

dessen Lösung mit  $c_1 = c_2 = C_{11} = C_{12} = 1/6$  und  $\eta = 3/2$  gleichzeitig dem exakten Resultat entspricht<sup>27</sup>. Genauso wie die Korrelatorenmatrix  $c_{\mathbf{q}}$  nicht von  $\mathbf{q}$  abhängt, so sind die Korrelationsfunktionen im Ortsraum mit  $\langle \mathbf{S}_{m\alpha} \mathbf{S}_{n\beta} \rangle = 3c_{m\alpha,n\beta}/2 = 1/4$  abstandsunabhängig; die Korrelationslänge  $\xi_F = \sqrt{2\eta c_1 / (1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2)}$  divergiert vermöge der erfüllten Kondensatbedingung (3.22). Einsetzen der Lösung in die Dispersionsrelationen ergibt in Übereinstimmung mit der LSWT für  $s = 1/2$

$$\begin{aligned} \omega_{1\mathbf{q}} &= -J(1 - \cos q_x) & \leftrightarrow & -2Js(1 - \cos q_x), \\ \omega_{1\mathbf{q}} &= -J(1 + \cos q_x) & \leftrightarrow & -2Js(1 + \cos q_x). \end{aligned}$$

Die Grundzustandenergie pro Spin ist von  $N$  unabhängig:  $E_0/JN = 1/4 = s^2$  mit negativem  $J$ . Folgende Fakten lassen sich nun verallgemeinern:

- Die RGM liefert insbesondere in ihrer Minimalversion vom Gitter unabhängig im Grundzustand immer das exakte Ergebnis, solange alle Kopplungen ferromagnetisch sind.

---

<sup>25</sup>Eine Rechnung mit  $G_{\mathbf{q}21}^{+-}(\omega)$  und  $G_{\mathbf{q}22}^{+-}(\omega)$  muß dasselbe ergeben.

<sup>26</sup>Für  $J > 0$  findet man mit (3.23)  $C_{11}/C_{12} = -1$ .

<sup>27</sup>Der Zustand parallel ausgerichteter Spins ist ein Eigenzustand von  $H$  und bei vorliegender ferromagnetischer Kopplung derjenige mit der tiefsten Energie.

- Im Grundzustand sind dann die Dispersionsrelationen der RGM mit denen der LSWT identisch, da letztere im Grundzustand ebenfalls exakt wird.

Diese Eigenschaften lassen sich bei der Fehlersuche nutzen. Als notwendige Bedingung sollte zumindest das exakte Ergebnis (alle Korrelatoren 1/6, alle Vertexparameter 3/2) im Grundzustand immer dann herauskommen, wenn alle  $J_{m\alpha,n\beta}$  negativ sind, d.h.  $c_{\mathbf{q}} = 1/3$  unabhängig von Modell und Gitter. Damit verbunden ist die Tatsache, daß das Verhältnis beliebiger statischer Suszeptibilitäten immer eins zu sein hat. Gleichzeitig lassen sich die Spinwellendispersionen im Rahmen einer LSWT um den vollständig polarisierten Zustand oftmals mit geringerem Aufwand berechnen. Einsetzen des exakten Resultats in die Dispersionsrelationen der RGM, ohne daß das Gleichungssystem vorher explizit gelöst zu werden braucht, muß die Spinwellendispersionen der LSWT reproduzieren. Von hohen Temperaturen kommend, geht die Lösung ohne Kondensat stetig in die Grundzustandslösung mit Kondensat über. Der Übergangspunkt ist demnach in Übereinstimmung mit dem Mermin-Wagner-Theorem  $T = 0^{28}$ .

$J > 0$ : Nimmt man an, daß Fernordnung im Grundzustand möglich ist, so gelangt man unter Berücksichtigung von (3.23) zu folgenden Dispersionsrelationen:

$$\omega_{1\mathbf{q}} = \omega_{2\mathbf{q}} = 2J\sqrt{-\eta c_1}\sqrt{1 - \cos^2 q_x}.$$

Dann hat die Korrelatorenmatrix aus (3.16) die Gestalt

$$c_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{-c_1}{\eta}} \sqrt{\frac{1}{1 - \cos^2 q_x}} \begin{pmatrix} 1 & -\cos q_x \\ -\cos q_x & 1 \end{pmatrix}.$$

Es wäre jetzt z.B. die Gültigkeit der Summenregel zu fordern. Im thermodynamischen Limes lautet sie

$$\frac{1}{2} = \underbrace{\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{-c_1}{\eta}} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \frac{dq_x}{\sqrt{1 - \cos^2 q_x}}}_{\frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}11} dq_x} + C_{11}.$$

Wenn man annimmt, daß ein von Null verschiedener Kondensatterm existiert, dann sollte obiges Integral endlich sein, was es aber nicht ist, weil es logarithmische Divergenzen besitzt. Offensichtlich führt die Annahme eines ferngeordneten Grundzustandes auf einen mathematischen Widerspruch<sup>29</sup>. Jedes andere Resultat würde zudem der exakten Bethe-Lösung widersprechen. Vielmehr erhält man im thermodynamischen Limes  $c_1 = -0.27703$ ,  $c_2 = 0.08050$  sowie  $\eta = 1.75441$  mit  $1 + 2\eta c_1 + 2\eta c_2 \neq 0$ , woraus  $E_0/JN = -0.4156$  [78] folgt. Vergleichend sei noch die exakte Energie, die von Hulthén [79] aus der Bethe-Lösung abgeleitet wurde, angegeben:  $E_0/JN = 1/4 - \ln 2 = -0.4431$ . Wie beim Kagomé-Gitter auch, erhält man trotz fehlender Fernordnung einen Spinwellenausdruck für die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes. Er lautet

$$\frac{E_0}{JN} = -s(s+1) + \frac{2s}{\pi},$$

---

<sup>28</sup>Damit verbunden ist  $\omega_{1\mathbf{q}} \sim q_x^2$  für  $T = 0$  und  $\omega_{1\mathbf{q}} \sim q_x$  für  $T > 0$ .

<sup>29</sup>Genauso äußert sich in der LSWT die Nichtexistenz magnetischer Ordnung. Wegen  $\omega_{\mathbf{q}} = 2Js\sqrt{1 - \cos^2 q_x}$  existiert keine endliche Untergittermagnetisierung.

also für  $s = 1/2$  folgt  $E_0/JN = -0.4317$ . Es ist überraschend, daß gerade die LSWT eine bessere Abschätzung für  $E_0$  liefert.

Auf der einen Seite ist die Korrelationslänge  $\xi_{AF}$  im Rahmen der RGM in jedem Fall endlich; insbesondere findet man im Grundzustand  $\xi_{AF} = 1.76963$ . Andererseits läßt sich aus dem exakten Ergebnis ableiten, daß  $\xi_{AF}$  mit einem potenzartigen Abfall der Korrelationsfunktionen über dem Abstand im Grundzustand divergieren sollte. Demnach scheint die RGM für Feinheiten, wie sie die Kritizität eines Spinsystems darstellt, nicht sensibel genug zu sein. Trotzdem ist  $\xi_{AF}$  als Korrelationslänge zu interpretieren, wenn man der Systematik in der Theorie folgt.

Es soll nun ein Zusammenhang zwischen der uniformen statischen Suszeptibilität  $\chi$  und der Matrix  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  aufgezeigt werden, der sich für Gitter mit Basis verallgemeinern läßt. Enthält die Elementarzelle nur einen Spin, so gilt einfach  $\chi = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) / 2$  [81]. Für die lineare Kette findet man entsprechend

$$\chi = \frac{-2c_1}{J(1 - 6\eta c_1 + 2\eta c_2)}. \quad (3.28)$$

Was bei zwei oder mehr Spins pro Elementarzelle zu tun ist, liegt nicht sofort auf der Hand. Ausgangspunkt der Betrachtungen ist daher die Beziehung

$$\chi = \frac{\langle S^z \rangle - \langle S^z \rangle^2}{N_s kT}.$$

Dabei ist  $S^z = \sum_{m\alpha} S_{m\alpha}^z$  der Operator der  $z$ -Komponente des Gesamtspins, und  $N_S$  ist die Gesamtzahl aller Spins. Weil  $\langle S_{m\alpha}^z \rangle = 0$  für jedes  $m\alpha$  gelten soll, verschwindet der Erwartungswert  $\langle S^z \rangle$  ebenfalls und man erhält  $\chi = \langle S^z \rangle / N_S kT$ . Mit  $N_E$  als Zahl der Gitterzellen folgt daraus

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{N_S kT} \sum_{m\alpha, n\beta} \langle S_{m\alpha}^z S_{n\beta}^z \rangle = \frac{1}{2N_S kT} \sum_{m\alpha, n\beta} \langle S_{m\alpha}^+ S_{n\beta}^- \rangle \\ &= \frac{N_E}{2N_S} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\alpha, \beta} \chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Bis auf den Vorfaktor  $N_E/2N_S$  ist  $\chi$  einerseits gleich der Summe über alle Matrixelemente von  $\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = -\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  im Punkt  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ; im vorliegenden Fall sind  $N_E = N/2$  und  $N_S = N$ , so daß sich (3.28) tatsächlich reproduzieren läßt. Andererseits ist unter Berücksichtigung von  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = -G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  der Darstellung (3.21) zu entnehmen, daß es sich bei  $\chi$  gleichzeitig um einen Eigenwert der Matrix  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) / 2$  handelt. Die Beziehung zwischen  $\chi$  und dem Eigenwertspektrum von  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  ist auch bei anderen Modellen, die der Autor daraufhin untersucht hat (Quadratgitter, Leiter, Kagomé-Gitter, geschichtetes Kagomé-Gitter), nachweisbar und deshalb bedingt verallgemeinerungswürdig<sup>30</sup>. Dort liefert derjenige Eigenwert, der der Summe über alle Matrixelemente proportional ist, stets die Kondensatbedingung für den rein ferromagnetischen Fall. Wenn alle Kopplungen ferromagnetisch sind, divergiert  $\chi$  zumindest im Grundzustand.

<sup>30</sup>Sowohl alle Diagonal- als auch alle Nebendiagonalelemente sind für sich in diesem Limes gleich. Mit  $n$  Spins pro Elementarzelle gibt es  $n^2$  Matrixelemente. Davon sind  $n$  Diagonal- und  $n(n-1)$  Nebendiagonalelemente  $a$  respektive  $b$ . Weiterhin gilt  $N_E/N_S = 1/n$ . Nach (3.29) findet man schließlich  $2\chi = a + (n-1)b$ . Wie sich zeigen läßt, ist die rechte Seite der letzten Gleichung immer ein Eigenwert einer  $n \times n$ -Matrix des Typs  $M_{\alpha, \beta} = a\delta_{\alpha, \beta} + b(1 - \delta_{\alpha, \beta})$ .

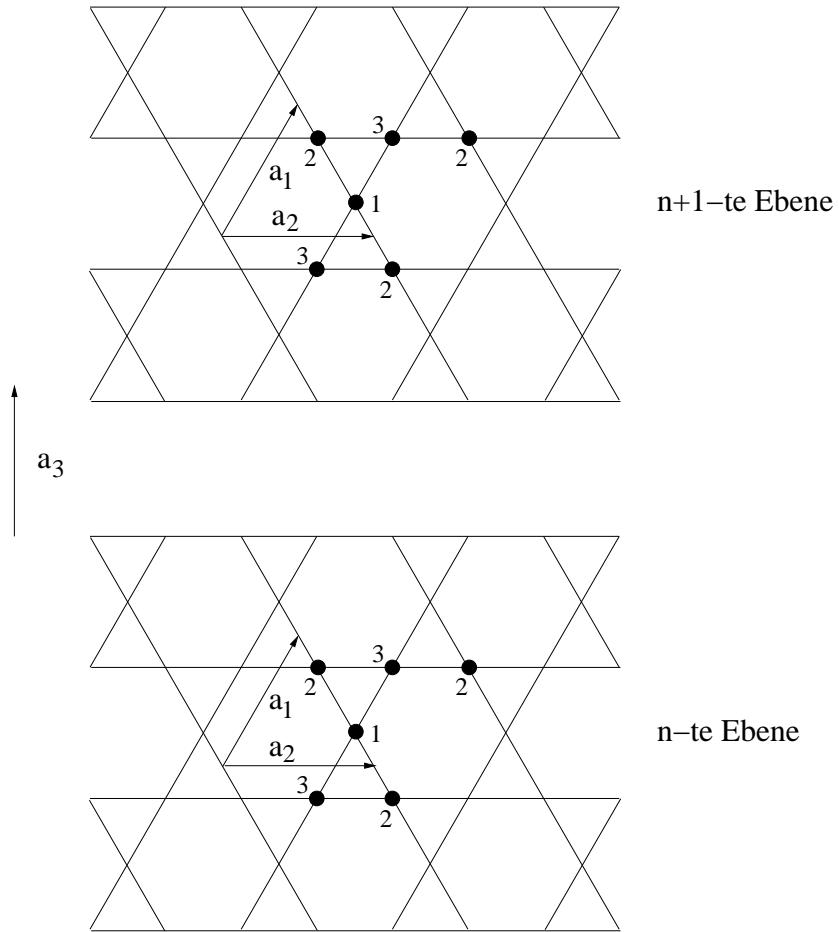


Abbildung 3.1: Das geschichtete Kagomé-Gitter mit den Basisvektoren  $\mathbf{a}_1 = (0, 2, 0)$ ,  $\mathbf{a}_2 = (\sqrt{3}, 1, 0)$  sowie  $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1)$ . Die einzelnen Ebenen liegen deckungsgleich übereinander, wobei ein Index die Spins innerhalb der Elementarzelle durchnumeriert.

### 3.3 Das geschichtete Kagomé-Gitter

Wie bereits in den Ausführungen im Zusammenhang mit dem Maple-Leaf-Gitter deutlich wurde, ist der HAFM auf dem puren Kagomé-Gitter ein Kandidat für ein quantenungeordnetes Spinsystem, in dem es bestenfalls kurzreichweite Ordnung gibt. Man vermutet, daß es einen Zusammenhang zwischen der wahrscheinlichen Nichtexistenz von magnetischer Fernordnung und der bereits erwähnten unendlichen Entartung des klassischen Grundzustandes infolge der starken Frustration gibt. Aus der LSWT lassen sich wegen der flachen Nullmode keine quantitativen Aussagen ableiten<sup>31</sup>. Dagegen bietet die RGM als alternative Theorie die Möglichkeit, sowohl Ordnung als auch Unordnung in Spinsystemen formal gleichermaßen zu erfassen. Gerade in den letzten Jahren haben sich deshalb verschiedene Autoren [28, 29] genau der Frage zugewandt, zu welchem Schluß die RGM für den HAFM auf dem Kagomé-Gitter kommt. Tatsächlich beschreibt die RGM einen kurzreichweitig geordneten Grundzustand, in dem eine Spinflüssigkeitsphase vorliegt. In dieser Arbeit soll nun ein Modell im Rahmen

---

<sup>31</sup>Vom mathematischen Standpunkt aus sind flache Nullmoden immer ein Hinweis auf Unordnung.

der RGM untersucht werden, das eine Verallgemeinerung des zweidimensionalen Kagomé-Gitters dahingehend darstellt, daß die üblichen Kagomé-Ebenen miteinander in einer dreidimensionalen Struktur koppeln. Man gelangt auf diese Weise zum geschichteten Kagomé-Gitter. In Abb. 3.1 ist dieses Gitter in Ermangelung der Möglichkeit der perspektivischen Darstellung bei gleichzeitiger Beibehaltung der Übersichtlichkeit nur schematisch wiedergegeben. Beschrieben werden soll dieses Modell durch einen Hamilton-Operator des Typs (3.1) für Spins  $s = 1/2$ . Die Kopplungen seien nur zwischen nächsten Nachbarn von Null verschieden mit

$$J_{m\alpha,n\beta} \rightarrow J_\perp \delta_{\alpha,\beta} + J_\parallel (1 - \delta_{\alpha,\beta}).$$

Dabei ist  $J_\parallel$  die Ebenenkopplung und  $J_\perp$  die Zwischenebenenkopplung. Studiert werden alle denkbaren Vorzeichenverhältnisse. Demzufolge sind vier Fälle zu unterscheiden. Weiterhin seien  $N$  Spins vorhanden. Wegen der speziellen Wahl der Kopplungen besitzt jede geometrische Elementarzelle drei Spins, so daß es  $N/3$  Elementarzellen gibt. In allen vier zu untersuchenden Fällen genügt eine Theorie, die vom geometrischen Gitter ausgeht, da  $J_\perp$  nicht zusätzlich frustriert. Weil  $J_\perp$  nicht zusätzlich frustriert, ist der klassische Grundzustand für  $J_\parallel > 0$  genauso hochgradig entartet wie im zweidimensionalen Fall. Vor allem interessiert hier die Frage, ob ein von Null verschiedenes  $J_\perp$  für  $J_\parallel > 0$  insbesondere zu einem ferngeordneten Grundzustand führt. Auf den Einfluß der Zwischenebenenkopplung in quasizweidimensionalen Spinsystemen ist bereits in der Einführung eingegangen worden. Folgende Szenarien sind für  $J_\parallel > 0$  beim Einschalten von  $J_\perp$  im Grundzustand denkbar:

- Sobald  $J_\perp \neq 0$  gilt, setzt langreichweitige Ordnung ein.
- Langreichweitige Ordnung kommt erst bei einem endlichen  $J_\perp$  zustande.
- Es gibt trotz  $J_\perp \neq 0$  niemals Fernordnung.

Wenn magnetische Fernordnung auftreten sollte, so ist außerdem zu berücksichtigen, daß das betrachtete Modell zwischen dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter und der linearen Kette interpoliert, d.h. bei positivem Vorzeichen von  $J_\perp$  die Fernordnung wiederum verschwinden könnte. Im Spinsystem vollzieht sich gleichzeitig ein Übergang hinsichtlich seiner Dimensionalität; von zwei zu drei Dimensionen wieder hin zu einer Dimension. Dieser Übergang könnte sich auch in der Temperaturabhängigkeit solcher Größen wie der spezifischen Wärme niederschlagen.

Begonnen wird nun mit der Aufstellung der Momentenmatrix  $M_q$  unter Verwendung der Vektoren  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{a}_1/2, \mathbf{r}_2 = \mathbf{a}_2/2$  sowie  $\mathbf{r}_3 = \mathbf{a}_3$

$$M_{q\alpha\beta} = \frac{6}{N} \sum_{m,n} J_{m\alpha,n\beta} c_{m\alpha,n\beta} \exp(i\mathbf{qr}_{m\alpha,n\beta}) - \frac{6}{N} \delta_{\alpha,\beta} \sum_{m,l\gamma} J_{m\alpha,l\gamma} c_{m\alpha,l\gamma}.$$

Man findet z.B. für  $\alpha = \beta = 1$

$$\begin{aligned} M_{q11} &= 2J_\perp (c_{11}(\mathbf{r}_3) \exp(i\mathbf{qr}_3) + c_{11}(-\mathbf{r}_3) \exp(-i\mathbf{qr}_3)) \\ &- 2J_\perp (c_{11}(\mathbf{r}_3) + c_{11}(-\mathbf{r}_3)) \\ &- 2J_\parallel (c_{12}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + c_{12}(-\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + c_{13}(\mathbf{r}_1) + c_{13}(-\mathbf{r}_1)). \end{aligned}$$

Hier wie auch bei den übrigen Matrixelementen lassen sich die Korrelatoren sinnvollerweise zusammenfassen. Dann erhält man mit der Notation  $c_{i,j,k} \equiv c(i\mathbf{r}_1 + j\mathbf{r}_2 + k\mathbf{r}_3)$

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{q}11} &= M_{\mathbf{q}22} = M_{\mathbf{q}33} = -4J_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos(\mathbf{qr}_3)) - 8J_{\parallel}c_{1,0,0}, \\ M_{\mathbf{q}12} &= M_{\mathbf{q}21} = 4J_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)), \\ M_{\mathbf{q}13} &= M_{\mathbf{q}31} = 4J_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{qr}_1), \\ M_{\mathbf{q}23} &= M_{\mathbf{q}32} = 4J_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{qr}_2). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Die Matrix  $M_{\mathbf{q}}$  hat die angenehme Eigenschaft hermitesch zu sein. Da  $J_{\perp}$  einzig additiv in der Gestalt von  $-4J_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos(\mathbf{qr}_3))$  ausschließlich in den Diagonalelementen von  $M_{\mathbf{q}}$  auftritt, gilt

$$[M_{\mathbf{q}}(J_{\perp} = 0), M_{\mathbf{q}}(J_{\perp} \neq 0)]_- = 0,$$

so daß die Eigenvektoren der Momentenmatrix nicht von  $q_z$  abhängen können.

Eine vergleichsweise aufwendige Rechnung liefert die Matrixelemente der Frequenzmatrix  $F_{\mathbf{q}}$ , die ebenfalls hermitesch ist. Im Rahmen der zuvor besprochenen Minimalversion sind zwei Vertexparameter einzuführen. Alle Korrelatoren in der Ebene werden mit  $\eta_{\parallel}$  und alle Korrelatoren zwischen den Ebenen werden mit  $\eta_{\perp}$  versehen. Als Matrixelemente erhält man

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{q}11} &= 2J_{\parallel}^2(1 + \eta_{\parallel}c_{1,0,0}(\cos(2\mathbf{qr}_1) + \cos(2\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)))) \\ &\quad + 2\eta_{\parallel}(c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}) \\ &\quad + J_{\perp}^2(1 - \cos(\mathbf{qr}_3))(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos(\mathbf{qr}_3))) \\ &\quad + 8J_{\parallel}J_{\perp}(2\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 - \cos(\mathbf{qr}_3)) + \cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})), \\ F_{\mathbf{q}22} &= 2J_{\parallel}^2(1 + \eta_{\parallel}c_{1,0,0}(\cos(2\mathbf{qr}_2) + \cos(2\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)))) \\ &\quad + 2\eta_{\parallel}(c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}) \\ &\quad + J_{\perp}^2(1 - \cos(\mathbf{qr}_3))(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos(\mathbf{qr}_3))) \\ &\quad + 8J_{\parallel}J_{\perp}(2\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 - \cos(\mathbf{qr}_3)) + \cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})), \\ F_{\mathbf{q}33} &= 2J_{\parallel}^2(1 + \eta_{\parallel}c_{1,0,0}(\cos(2\mathbf{qr}_1) + \cos(2\mathbf{qr}_2))) \\ &\quad + 2\eta_{\parallel}(c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}) \\ &\quad + J_{\perp}^2(1 - \cos(\mathbf{qr}_3))(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos(\mathbf{qr}_3))) \\ &\quad + 8J_{\parallel}J_{\perp}(2\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 - \cos(\mathbf{qr}_3)) + \cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})), \\ F_{\mathbf{q}12} &= F_{\mathbf{q}21} = J_{\parallel}^2(2\eta_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) \\ &\quad - \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))(1 + 2\eta_{\parallel}(3c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}))) \\ &\quad + 4J_{\parallel}J_{\perp}(\cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))\cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + \eta_{\perp}c_{0,0,1})) \\ &\quad - \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{1,0,1})), \\ F_{\mathbf{q}13} &= F_{\mathbf{q}31} = J_{\parallel}^2(2\eta_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_2)) \\ &\quad - \cos(\mathbf{qr}_1)(1 + 2\eta_{\parallel}(3c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}))) \\ &\quad + 4J_{\parallel}J_{\perp}(\cos(\mathbf{qr}_1)\cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + \eta_{\perp}c_{0,0,1})) \\ &\quad - \cos(\mathbf{qr}_1)\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{1,0,1})), \\ F_{\mathbf{q}23} &= F_{\mathbf{q}32} = J_{\parallel}^2(2\eta_{\parallel}c_{1,0,0}\cos(\mathbf{q}(2\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \\ &\quad - \cos(\mathbf{qr}_2)(1 + 2\eta_{\parallel}(3c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}))) \\ &\quad + 4J_{\parallel}J_{\perp}(\cos(\mathbf{qr}_2)\cos(\mathbf{qr}_3)(\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + \eta_{\perp}c_{0,0,1})) \end{aligned}$$

$$-\cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_2)\eta_{\perp}(c_{0,0,1}+c_{1,0,1}) . \quad (3.31)$$

Sodann läßt sich zeigen, daß die Frequenzmatrix mit der Momentenmatrix vertauscht. Damit besitzen die gemeinsamen Eigenvektoren keine  $q_z$ -Abhängigkeit. Weiterhin existieren analytische Ausdrücke für die einzelnen Eigenwerte. Mit

$$\begin{aligned}
m_{1\mathbf{q}} &= -12J_{||}c_{1,0,0} - 4J_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z), \\
\omega_{1\mathbf{q}}^2 &= 3J_{||}^2(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) \\
&+ J_{\perp}^2(1 - \cos q_z)(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos q_z)) \\
&+ 4J_{||}J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) - 2\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 + \cos q_z) \\
&+ 7\eta_{\perp}c_{1,0,1} - 3\eta_{||}c_{1,0,0}\cos q_z), \\
m_{2\mathbf{q}} &= -6J_{||}c_{1,0,0} - 4J_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) - 2J_{||}c_{1,0,0}D_{\mathbf{q}}, \\
\omega_{2\mathbf{q}}^2 &= J_{||}^2\left(\frac{3}{2} + 3\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})\right. \\
&+ 8\eta_{||}c_{1,0,0}\left(2\cos^4\frac{q_y}{2} + 2\cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\cos^2\frac{q_y}{2}\right. \\
&\left.\left.- \cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - 3\cos^2\frac{q_y}{2}\right)\right) \\
&+ J_{\perp}^2(1 - \cos q_z)(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos q_z)) \\
&+ J_{||}J_{\perp}(-8\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 + \cos q_z) - 2\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) \\
&- 6\eta_{||}c_{1,0,0}\cos q_z + 22\eta_{\perp}c_{1,0,1}) \\
&+ \frac{J_{||}}{2}(J_{||}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) \\
&+ 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) + \eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0}\cos q_z) D_{\mathbf{q}}, \\
m_{3\mathbf{q}} &= -6J_{||}c_{1,0,0} - 4J_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) + 2J_{||}c_{1,0,0}D_{\mathbf{q}}, \\
\omega_{3\mathbf{q}}^2 &= J_{||}^2\left(\frac{3}{2} + 3\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})\right. \\
&+ 8\eta_{||}c_{1,0,0}\left(2\cos^4\frac{q_y}{2} + 2\cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\cos^2\frac{q_y}{2}\right. \\
&\left.\left.- \cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - 3\cos^2\frac{q_y}{2}\right)\right) \\
&+ J_{\perp}^2(1 - \cos q_z)(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) - 4\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 + \cos q_z)) \\
&+ J_{||}J_{\perp}(-8\eta_{\perp}c_{1,0,1}(1 + \cos q_z) - 2\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) \\
&- 6\eta_{||}c_{1,0,0}\cos q_z + 22\eta_{\perp}c_{1,0,1}) \\
&- \frac{J_{||}}{2}(J_{||}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) \\
&+ 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{0,0,1}(1 - \cos q_z) + \eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0}\cos q_z) D_{\mathbf{q}} \quad (3.32)
\end{aligned}$$

und

$$D_{\mathbf{q}} = \sqrt{9 + 16\cos^4\frac{q_y}{2} + 16\cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2}\cos^2\frac{q_y}{2} - 8\cos^2\frac{\sqrt{3}q_x}{2} - 24\cos^2\frac{q_y}{2}}$$

erhält man die Lösungsmatrix zu

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \sum_{j=1}^3 \frac{m_{j\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{j\mathbf{q}}^2} |j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|.$$

Zur Untersuchung des Tieftemperaturverhaltens der spezifischen Wärme sind später die normierten Eigenvektoren in der Grenze  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  von Interesse, die durch

$$|1\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |2\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |3\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

gegeben sind. Ferner muß untersucht werden, ob  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  im Limes  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  für beliebige  $\eta_{||}$  und  $\eta_{\perp}$  isotrop ist<sup>32</sup>. Die konkrete Rechnung zeigt, daß der Isotropieforderung von selbst nicht genügt wird. Vielmehr ist wegen

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) \approx \frac{a_{||\alpha\beta} q_{||}^2 + a_{\perp\alpha\beta} q_{\perp}^2}{b_{||\alpha\beta} q_{||}^2 + b_{\perp\alpha\beta} q_{\perp}^2}$$

mit  $q_{||}^2 = q_x^2 + q_y^2$  sowie  $q_{\perp}^2 = q_z^2$  die Gültigkeit der Gleichungen

$$\frac{a_{||\alpha\beta}}{b_{||\alpha\beta}} - \frac{a_{\perp\alpha\beta}}{b_{\perp\alpha\beta}} = 0$$

zur Bedingung zu machen. Diese Gleichungen dienen zusätzlich der Bestimmung der Vertexparameter. In der vorliegenden Minimalversion der RGM für das geschichtete Kagomé-Gitter sind zwei Vertexparameter eingeführt worden. Es gibt aber effektiv nur eine Summenregel, denn alle drei werden gleichzeitig erfüllt. Wenn also die Theorie widerspruchsfrei bleiben soll, dann darf die Forderung nach Isotropie de facto nur genau eine weitere Gleichung liefern. Dies gilt es jetzt zu prüfen. Man findet

$$\begin{aligned} \frac{a_{||\alpha\beta}}{b_{||\alpha\beta}} &= \frac{4c_{1,0,0}}{f_{||}} (J_{||}(1 - 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})) \delta_{\alpha,\beta} \\ &+ \frac{16J_{||}\eta_{||}c_{1,0,0}^2}{f_{||}} (1 - \delta_{\alpha,\beta}) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} f_{||} &= (J_{||}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})) \times \\ &(J_{||}(1 - 2\eta_{||}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})) \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} \frac{a_{\perp\alpha\beta}}{b_{\perp\alpha\beta}} &= \frac{4}{3f_{\perp}} (J_{||}(c_{0,0,1}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 16\eta_{\perp}c_{1,0,0}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})) \\ &+ 2J_{\perp}(c_{1,0,0}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 2c_{0,0,1}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})) \delta_{\alpha,\beta} \\ &+ \frac{4}{3f_{\perp}} (J_{||}(c_{0,0,1}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 8\eta_{\perp}c_{1,0,0}(c_{0,0,1} - c_{1,0,1})) \\ &- J_{\perp}(c_{1,0,0}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 4c_{0,0,1}(\eta_{||}c_{1,0,0} - \eta_{\perp}c_{1,0,1})) (1 - \delta_{\alpha,\beta}) \end{aligned}$$

---

<sup>32</sup>Der Betrachtung im Anschluß ist die Untersuchung des Eigenwertspektrums der Matrix  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  äquivalent. Während die Eigenwerte  $G_{j\mathbf{q}}^{+-} = -m_{j\mathbf{q}}/\omega_{j\mathbf{q}}^2$  für  $j = 1, 2$  in diesem Limes isotrop sind, ist es der Eigenwert  $G_{3\mathbf{q}}^{+-}$  nicht. Wenn man Isotropie auch für diesen Eigenwert fordert, so gelangt man ebenfalls zu (3.34).

mit

$$f_{\perp} = (J_{\parallel}(1 + 2\eta_{\parallel}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})) \times \\ (J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{\parallel}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})).$$

Zunächst erkennt man, daß zwei verschiedene Gleichungen existieren. Es sind also nur die Diagonal- bzw. die Nebendiagonalelemente miteinander zu vergleichen. In der Tat erhält man nach kurzer Rechnung die Bedingung

$$c_{1,0,0}(J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{\parallel}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})) \\ - c_{0,0,1}(J_{\parallel}(1 - 2\eta_{\parallel}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) \\ + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})) = 0, \quad (3.34)$$

die simultan die Differenzen der entsprechenden Matrixelemente zu Null macht. Die Forderung nach Isotropie führt also auf genau eine zusätzliche Gleichung für  $\eta_{\perp}$ . Damit ist gesichert, daß es genauso viele Gleichungen gibt wie Unbekannte. Abschließend soll die uniforme statische Suszeptibilität  $\chi$  nach (3.29) mit  $N_S/N_E = 3$  berechnet werden. Ausführen der Summation liefert

$$\chi = \frac{-2c_{1,0,0}}{J_{\parallel}(1 - 2\eta_{\parallel}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})}, \quad (3.35)$$

welches wegen (3.34) mit

$$\chi = \frac{-2c_{0,0,1}}{J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{\parallel}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})}$$

übereinstimmt. Wie man sich leicht überzeugen kann, ist  $\chi$  gleichzeitig auch ein Eigenwert der Matrix

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)/2,$$

die in diesem Limes mit  $a\delta_{\alpha,\beta} + b(1 - \delta_{\alpha,\beta})$  eine einfache Gestalt hat. Ausgestattet mit dem nötigen theoretischen Rüstzeug, können nunmehr die einzelnen Fälle eingehend betrachtet werden. Dabei soll so vorgegangen werden, daß alternativ soweit wie möglich auch eine entsprechende Spinwellentheorie für beliebiges  $s$  präsentiert wird.

### 3.3.1 Der Fall $J_{\parallel} < 0, J_{\perp} < 0$

Der klassische Grundzustand ist in diesem Fall trivial. Alle Spins weisen in dieselbe Richtung, was durch  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  beschrieben wird. Die Resultate von LSWT und RGM sollten im Grundzustand übereinstimmen.

**Lineare Spinwellentheorie für  $J_{\parallel} < 0$  und  $J_{\perp} < 0$ :** Nach (2.9) lautet der bosonische Hamilton-Operator

$$H = 2J_{\parallel}Ns^2 + J_{\perp}Ns^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\ H_{\mathbf{q}} = (-4J_{\parallel}s - 2J_{\perp}s(1 - \cos(\mathbf{qr}_3))) (a_{1\mathbf{q}}^+a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+a_{3\mathbf{q}}) \\ + 2J_{\parallel}s \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+a_{2\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}}a_{2\mathbf{q}}^+) \\ + 2J_{\parallel}s \cos(\mathbf{qr}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+a_{3\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}a_{3\mathbf{q}}^+) \\ + 2J_{\parallel}s \cos(\mathbf{qr}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+a_{1\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}a_{1\mathbf{q}}^+), \quad (3.36)$$

so daß die üblichen Diagonalisierungsprozeduren - hier werden Greensche Funktionen entsprechend Abschnitt 2.1.2 benutzt - auf

$$\begin{aligned}\omega_{1\mathbf{q}} &= -6J_{\parallel}s - 2J_{\perp}s(1 - \cos q_z), \\ \omega_{2\mathbf{q}} &= -3J_{\parallel}s - 2J_{\perp}s(1 - \cos q_z) - J_{\parallel}sD_{\mathbf{q}}, \\ \omega_{3\mathbf{q}} &= -3J_{\parallel}s - 2J_{\perp}s(1 - \cos q_z) + J_{\parallel}sD_{\mathbf{q}}\end{aligned}\quad (3.37)$$

führen. Da in (3.36) keine Terme der Form  $a_{m\mathbf{q}}^+a_{n-\mathbf{q}}^+$  bzw.  $a_{m\mathbf{q}}a_{n-\mathbf{q}}$  auftauchen - alle Kopplungen sind ferromagnetisch -, treten die  $\omega_{m\mathbf{q}}$  als Pole der beteiligten Greenschen Funktionen nur einfach mit positiven Vorzeichen auf. Alsdann ergibt sich für die innere Energie  $E$

$$\begin{aligned}E &= (2J_{\parallel} + J_{\perp})Ns(s+1) \\ &+ \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^3 \omega_{m\mathbf{q}} \left( \frac{1}{\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1} + \frac{1}{2} \right),\end{aligned}\quad (3.38)$$

woraus man  $E_0/N = (2J_{\parallel} + J_{\perp})s^2$  erhält. Weiterhin gilt im Grundzustand  $\langle S_m'^z \rangle = s$  für  $m = 1, 2, 3$ . Die Gleichheit der Untergittermagnetisierungen ist auch bei endlichen Temperaturen gegeben, was an sich vernünftig ist. Dennoch ist die Beschreibung des Überganges von der geordneten Phase in die thermisch ungeordnete Phase im Rahmen der LSWT inkonsistent und unphysikalisch, was in Abb. 3.3 sowie Abb. 3.4 zum Ausdruck kommt<sup>33</sup>. Die Korrelationsfunktionen klingen in einer Weise ab, in der sie sich im Hochtemperaturlimes nicht asymptotisch der Null nähern. Vielmehr gibt es direkte Nulldurchgänge bei endlichen Temperaturen, die sich zudem voneinander unterscheiden<sup>34</sup>. Außerdem findet man ein lineares Einmünden der Magnetisierung am "Übergangspunkt" vor, obwohl sie dort einem Potenzgesetz mit dem kritischen Index 1/2 gehorchen sollte. Es wird also deutlich, daß die LSWT zur Charakterisierung zunehmend ungeordneter Strukturen vollkommen ungeeignet ist und bestenfalls den Grundzustand und daran anschließend die Tieftemperatureigenschaften korrekt beschreiben kann.

Ausgehend von (3.37) und (3.38), erfolgt nun exemplarisch die Ableitung der spezifischen Wärme im Tieftemperaturregime. Bei genügend tiefen Temperaturen liefert nur die akustische Mode  $\omega_{3\mathbf{q}}$  in der Umgebung von  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  wesentliche Beiträge zur Summe. Aus der Entwicklung<sup>35</sup> von  $\omega_{3\mathbf{q}}$  in dieser Umgebung folgt beim gleichzeitigen Übergang zum thermodynamischen Limes

$$E = (2J_{\parallel} + J_{\perp})Ns^2 + \frac{N}{3V_{BRZ}} \int_{BRZ} \frac{-J_{\parallel}s(q_x^2 + q_y^2) - J_{\perp}sq_z^2}{\exp((-J_{\parallel}s(q_x^2 + q_y^2) - J_{\perp}sq_z^2)/kT) - 1} d^3q.$$

Um dieses Integral zu lösen, kann wegen der Exponentialfunktion im Nenner das Integrationsgebiet ins Unendliche ausgedehnt werden, wonach sich die Einführung von

---

<sup>33</sup>Zum besseren Vergleich sind die Abbildungen weiter hinten zu finden.

<sup>34</sup>Die Quantenkorrekturen, die durch die LSWT gegeben sind, wachsen stetig mit der Temperatur. Dies entspricht dem Bild angeregter Magnonen, welches aber nur für tiefe Temperaturen richtig ist. Irgendwann ist die Quantenkorrektur einer Korrelationsfunktion größer als ihr klassischer Wert. Ab da bekommt die entsprechende Korrelationsfunktion zusätzlich das falsche Vorzeichen. Dies gilt genauso für die Magnetisierung.

<sup>35</sup>Immer dann, wenn in dieser Arbeit z.B. Dispersionsrelationen um bestimmte Punkte  $\mathbf{Q}$  entwickelt werden, wird stillschweigend vorausgesetzt, daß zuvor  $\mathbf{q}$  durch  $\mathbf{Q} + \mathbf{q}$  ersetzt wurde.

Zylinderkoordinaten empfiehlt:

$$q_x = \rho \cos \varphi, \quad q_y = \rho \sin \varphi, \quad q_z = q_z$$

mit  $\rho \in [0, +\infty]$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi]$  sowie  $q_z \in [-\infty, +\infty]$ . Dann gilt

$$\begin{aligned} E &= (2J_{||} + J_{\perp}) N s^2 \\ &+ \frac{N}{3V_{BRZ}} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-J_{||} s \rho^3 - J_{\perp} s q_z^2 \rho}{\exp((-J_{||} s \rho^2 - J_{\perp} s q_z^2) / kT) - 1} d\rho d\varphi dq_z, \end{aligned}$$

wobei die Integration über  $\varphi$  sofort ausgeführt werden kann, so daß daraus

$$E = (2J_{||} + J_{\perp}) N s^2 + \frac{2\pi N}{3V_{BRZ}} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-J_{||} s \rho^3 - J_{\perp} s q_z^2 \rho}{\exp((-J_{||} s \rho^2 - J_{\perp} s q_z^2) / kT) - 1} d\rho dq_z$$

folgt. Eine weitere Koordinatentransformation lautet dann

$$\rho = r \sin \theta / \sqrt{-J_{||} s}, \quad q_z = r \cos \theta / \sqrt{-J_{\perp} s}$$

mit  $r \in [0, +\infty]$ ,  $\theta \in [0, \pi]$ . Auch hier läßt sich die Integration über  $\theta$  sofort ausführen:

$$E = (2J_{||} + J_{\perp}) N s^2 + \frac{4\pi N}{3V_{BRZ} \sqrt{-J_{||}^2 J_{\perp} s^3}} \int_0^{+\infty} \frac{r^4}{\exp(r^2/kT) - 1} dr,$$

woraus sich nach letztmaliger Substitution  $r^2 = kTx$

$$E = (2J_{||} + J_{\perp}) N s^2 + \frac{2\pi N (kT)^{5/2}}{3V_{BRZ} \sqrt{-J_{||}^2 J_{\perp} s^3}} \underbrace{\int_0^{+\infty} \frac{x^{3/2}}{\exp(x) - 1} dx}_{3\sqrt{\pi}\zeta(5/2)/4}$$

ergibt. Damit findet man mit  $V_{BRZ} = 4\pi^3/\sqrt{3}$  die für einen dreidimensionalen Ferromagneten korrekten Temperaturabhängigkeiten der Energie respektive der spezifischen Wärme zu

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= (2J_{||} + J_{\perp}) s^2 + \frac{\sqrt{3}\zeta(5/2)}{8\sqrt{-J_{||}^2 J_{\perp} s^3 \pi^3}} (kT)^{5/2}, \\ \frac{C}{N} &= \frac{5\sqrt{3}\zeta(5/2)}{16\sqrt{-J_{||}^2 J_{\perp} s^3 \pi^3}} (kT)^{3/2}. \end{aligned} \tag{3.39}$$

**Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für  $J_{||} < 0$  und  $J_{\perp} < 0$ :** Begonnen wird mit dem Grundzustand. Dann ist von vornherein klar, daß magnetische Fernordnung existiert, und zwar mit  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ . Diese ferromagnetische Ordnung wird sich darüber hinaus wegen der Dreidimensionalität des Spinsystems auch thermischen Fluktuationen gegenüber bis zu einem gewissen Maß als resistent erweisen. Es ist also eine von

Null verschiedene Übergangstemperatur  $kT_C$  zu erwarten, solange  $J_\perp < 0$  gilt. Für  $kT < kT_C$  lautet das selbstkonsistent zu lösende Gleichungssystem

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{qr}_1) + C_{13}, \quad c_{1,1,0} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}12} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) + C_{12}, \\ c_{2,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_1) + C_{11}, \quad c_{0,0,1} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i\mathbf{qr}_3) + C_{11}, \\ c_{1,0,1} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3)) + C_{13}, \quad c_{0,0,2} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_3) + C_{11}, \\ \frac{1}{2} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} c_{\mathbf{q}11} + C_{11}. \end{aligned} \tag{3.40}$$

Als Kondensatbedingungen findet man

$$J_{||} (1 - 2\eta_{||} (4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_\perp (\eta_\perp c_{1,0,1} - \eta_{||} c_{1,0,0}) = 0 \tag{3.41}$$

sowie

$$J_\perp (1 - 2\eta_\perp (3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{||}\eta_\perp (c_{1,0,1} - c_{0,0,1}) = 0. \tag{3.42}$$

Hervorzuheben ist die Tatsache, daß sich beide Kondensatbedingungen aus dem Eigenwert  $G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = m_{3\mathbf{q}} / (\omega^2 - \omega_{3\mathbf{q}}^2)$  ableiten lassen<sup>36</sup>. Alle übrigen spielen bei den vorliegenden Kopplungsverhältnissen offenbar keine Rolle. In Analogie zur linearen Kette lassen sich demnach auch hier bestimmte Eigenwerte der Lösungsmatrix eindeutig einzelnen Fällen zuordnen. Die erste Kondensatbedingung (3.41) ergibt sich durch die Untersuchung von  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$ , nachdem man  $q_z = 0$  gesetzt hat. Sie ist leicht als die korrekte Kondensatbedingung dadurch zu identifizieren, daß sich einerseits die Vorzeichenverhältnisse der einzelnen Korrelatoren richtig reproduzieren lassen und andererseits sie für  $J_\perp = 0$  in die Kondensatbedingung für einen Ferromagneten auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter übergeht. Demgegenüber gewinnt man die zweite Kondensatbedingung (3.42) aus  $q_z \rightarrow 0$ , wobei zuvor  $q_x$  und  $q_y$  Null gesetzt wurden. Im Limes  $J_{||} = 0$  folgt aus ihr (3.22), die Kondensatbedingung für einen Ferromagneten auf der linearen Kette. Im übrigen ist die Gültigkeit von (3.34) nicht extra zu fordern, weil diese Bedingung durch beide Kondensatbedingungen automatisch befriedigt wird. Auf diese Weise liegen nun neun Gleichungen zur Bestimmung von elf Unbekannten vor. Es fehlen also noch zwei Gleichungen, die zusammen die Kondensatparameter  $C_{12}$  und  $C_{13}$  festlegen. Tatsächlich liefert die Anwendung von (3.25)<sup>37</sup>

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} = \frac{C_{11}}{C_{13}} = \frac{J_{||} (1 - 2\eta_{||} (2c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_\perp (\eta_\perp c_{1,0,1} - \eta_{||} c_{1,0,0})}{4J_{||}\eta_{||} c_{1,0,0}}. \tag{3.43}$$

Berücksichtigt man außerdem die erste Kondensatbedingung (3.41), so folgt sofort  $C_{11} = C_{12} = C_{13}$ . Übersteigt  $kT$  die kritische Temperatur  $kT_C$ , so reduziert sich das

<sup>36</sup>Es ist die Divergenz von  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  zu fordern. Weil dieser Grenzwert vorerst nicht isotrop ist, gibt es - je nach dem, wie der Grenzübergang  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  ausgeführt wird - zwei Kondensatbedingungen. Beide Kondensatbedingungen hängen mit (3.34) zusammen.

<sup>37</sup>Hier mit  $q_z = 0, q_x \rightarrow 0, q_y \rightarrow 0$ . Setzt man zuerst  $q_x = q_y = 0$  und führt danach  $q_z \rightarrow 0$  aus, so liefert das unter Beachtung der anderen Kondensatbedingung dasselbe Resultat.

Gleichungssystem auf

$$\begin{aligned}
c_{1,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{qr}_1), \quad c_{1,1,0} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}12} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)), \\
c_{2,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_1), \quad c_{0,0,1} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i\mathbf{qr}_3), \\
c_{1,0,1} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3)), \quad c_{0,0,2} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_3), \\
\frac{1}{2} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}11}
\end{aligned} \tag{3.44}$$

im Verbund mit (3.34). Im Grundzustand liefert (3.40) zusammen mit den beiden Kondensatbedingungen sowie unter Berücksichtigung der Relationen zwischen den Kondensattermen erwartungsgemäß folgendes Resultat für beliebige ferromagnetische Kopplungen:

$$\begin{aligned}
c_{1,0,0} &= c_{1,1,0} = c_{2,0,0} = c_{0,0,1} = c_{1,0,1} = c_{0,0,2} = \frac{1}{6}, \\
\eta_{||} &= \eta_{\perp} = \frac{3}{2}, \\
C_{11} &= C_{12} = C_{13} = \frac{1}{6},
\end{aligned}$$

welches außerdem noch unabhängig von  $N$  ist. Mit dieser Lösung hat die Korrelatorenmatrix die einfache Gestalt  $c_{\mathbf{q}} = 1/3$ , so daß die Korrelationsfunktionen mit  $\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle = 3c_{\mathbf{R}}/2 = 1/4$  abstandsunabhängig werden. Aus (3.14) gewinnt man die Ordnungsparameter  $M_{\alpha\beta}^2$  bzw. die Magnetisierung  $M$  zu

$$M_{\alpha\beta}^2 = \frac{1}{4}, \quad M = M_1 = M_2 = M_3 = \frac{1}{2}. \tag{3.45}$$

Weiterhin ist evident, daß im Grundzustand die Spinwellendispersionen der LSWT mit den Polen aus (3.32) zusammenfallen:

$$\begin{aligned}
\omega_{1\mathbf{q}} &= -3J_{||} - J_{\perp}(1 - \cos q_z), \\
\omega_{2\mathbf{q}} &= -\frac{3J_{||}}{2} - J_{\perp}(1 - \cos q_z) - \frac{J_{||}}{2}D_{\mathbf{q}}, \\
\omega_{3\mathbf{q}} &= -\frac{3J_{||}}{2} - J_{\perp}(1 - \cos q_z) + \frac{J_{||}}{2}D_{\mathbf{q}}.
\end{aligned}$$

Für die innere Energie findet man

$$E = 3J_{||}Nc_{1,0,0} + \frac{3J_{\perp}N}{2}c_{0,0,1}. \tag{3.46}$$

Im Grundzustand ergibt sich daraus in Korrespondenz zur LSWT das exakte Resultat zu  $E_0/N = J_{||}/2 + J_{\perp}/4$ . Die Übereinstimmung zwischen LSWT und RGM für kleine  $T$  legt die Frage nahe, inwieweit zumindest näherungsweise die spezifische Wärme für tiefe Temperaturen einer ähnlichen Beziehung wie (3.39) genügt. Gesucht sind also die

ersten Temperaturkorrekturen von (3.46). Dazu wird davon ausgegangen, daß bei hinreichend tiefen Temperaturen alle Korrelatoren sich nur gering von 1/6 unterscheiden und außerdem  $\eta_{||} = \eta_{\perp} \approx 3/2$  gilt. Die relevanten tiefliegenden Anregungen werden durch  $\omega_{3q}$  beschrieben. Man findet zunächst unter Einbeziehung der Summenregel

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= \frac{1}{2} + \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{qr}_1) - c_{\mathbf{q}11}, \\ c_{0,0,1} &= \frac{1}{2} + \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} c_{\mathbf{q}11} (\exp(-i\mathbf{qr}_3) - 1). \end{aligned}$$

Weiterhin sei an die Beziehungen (3.16) und (3.33) erinnert, so daß näherungsweise

$$c_{\mathbf{q}\alpha\beta} = \frac{1}{3} \delta_{\alpha,\beta} + \frac{2}{9} n(\omega_{3q}) \quad (3.47)$$

gilt, woraus wiederum

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= \frac{1}{6} + \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{2n(\omega_{3q})}{9} (\exp(-i\mathbf{qr}_1) - 1), \\ c_{0,0,1} &= \frac{1}{6} + \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \frac{2n(\omega_{3q})}{9} (\exp(-i\mathbf{qr}_3) - 1) \end{aligned} \quad (3.48)$$

folgt. Dann verhält sich die innere Energie wie

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} E_{\mathbf{q}}, \\ E_{\mathbf{q}} &= 2J_{||}n(\omega_{3q}) (\exp(-i\mathbf{qr}_1) - 1) + J_{\perp}n(\omega_{3q}) (\exp(-i\mathbf{qr}_3) - 1). \end{aligned}$$

Von Interesse ist nunmehr die Auswertung der Summe im thermodynamischen Limes, wobei nur kleine Wellenzahlen wesentliche Beiträge liefern. Dann geht die Summe in ein Integral über, das über den gesamten Raum erstreckt werden kann. Alsdann sind die Integranden zu entwickeln. Lineare Anteile in den Exponentialfunktionen heben sich heraus, so daß man

$$E = E_0 + \frac{N}{3V_{BRZ}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-J_{||}q_y^2 - \frac{J_{\perp}}{2}q_z^2}{\exp\left(\left(-\frac{J_{||}}{2}(q_x^2 + q_y^2) - \frac{J_{\perp}}{2}q_z^2\right)/kT\right) - 1} dq_x dq_y dq_z$$

erhält. Die Einführung von Zylinderkoordinaten ergibt dann

$$E = E_0 + \frac{N\pi}{3V_{BRZ}} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-J_{||}\rho^3 - J_{\perp}q_z^2\rho}{\exp\left(\left(-\frac{J_{||}}{2}\rho^2 - \frac{J_{\perp}}{2}q_z^2\right)/kT\right) - 1} d\rho dq_z.$$

Ein Integral diesen Typs taucht bereits in der Ableitung der spezifischen Wärme im Rahmen der LSWT auf, wenn man dort  $s = 1/2$  setzt. Im Ergebnis findet man also

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= \frac{J_{||}}{2} + \frac{J_{\perp}}{4} + \frac{\sqrt{3}\zeta(5/2)}{\sqrt{-8J_{||}^2 J_{\perp} \pi^3}} (kT)^{5/2}, \\ \frac{C}{N} &= \frac{5\sqrt{3}\zeta(5/2)}{2\sqrt{-8J_{||}^2 J_{\perp} \pi^3}} (kT)^{3/2}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Beide Formeln stimmen mit (3.39) für  $s = 1/2$  überein. Aus der Entwicklung von  $G_{3\mathbf{q}}^{+-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  in der Umgebung des magnetischen Ordnungsvektors nach (A.6) ergeben sich die Korrelationslängen. Um die Korrelationslängen in der Ebene abzuleiten, wird zunächst  $q_z = 0$  in  $G_{3\mathbf{q}}^{+-}$  eingesetzt, so daß man als zu untersuchende Größe  $G_{3q_x q_y}^{+-}$  erhält. Es gilt

$$\lim_{q_x, q_y \rightarrow 0} G_{3q_x q_y}^{+-} = \frac{4c_{1,0,0}}{J_{||}(1 - 2\eta_{||}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})}.$$

Zweimaliges Ableiten nach  $q_x$  bzw.  $q_y$  liefert in der Grenze übereinstimmend

$$-\frac{16J_{||}\eta_{||}c_{1,0,0}^2}{(J_{||}(1 - 2\eta_{||}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0}))^2}.$$

Im übrigen existiert wegen

$$\lim_{q_x, q_y \rightarrow 0} \frac{\partial^2 G_{3q_x q_y}^{+-}}{\partial q_x \partial q_y} = 0$$

kein Mischterm in der Entwicklung, dessen Interpretation Schwierigkeiten bereiten würde. Die Anwendung von (A.6) auf  $G_{3q_x q_y}^{+-}$  ergibt folglich  $\xi_{xx}^2 = \xi_{yy}^2 = \xi_{||}^2$  mit

$$\xi_{||}^2 = \frac{2J_{||}\eta_{||}c_{1,0,0}}{J_{||}(1 - 2\eta_{||}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0})}. \quad (3.50)$$

Für  $J_{\perp} = 0$  ist dies genau die Beziehung für die Korrelationslänge eines Ferromagneten auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter. Zum Erhalt der Korrelationslänge zwischen den Ebenen ist anders als zuvor  $q_x = q_y = 0$  in  $G_{3\mathbf{q}}^{+-}$  einzusetzen, so daß sich  $G_{3q_z}^{+-}$  ergibt. Insofern gilt jetzt

$$\lim_{q_z \rightarrow 0} G_{3q_z}^{+-} = \frac{4c_{0,0,1}}{J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{||}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})}.$$

Die zweite Ableitung von  $G_{3q_z}^{+-}$  im Limes  $q_z \rightarrow 0$  lautet

$$-\frac{16J_{\perp}\eta_{\perp}c_{0,0,1}^2}{(J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{||}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1}))^2},$$

woraus mit (A.6) und  $\xi_{zz}^2 = \xi_{\perp}^2$  in völlig symmetrischer Weise<sup>38</sup>

$$\xi_{\perp}^2 = \frac{2J_{\perp}\eta_{\perp}c_{0,0,1}}{J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{||}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})} \quad (3.51)$$

folgt. Auch diese Formel ist sofort evident, wenn man sie mit der Korrelationslänge eines Ferromagneten auf der linearen Kette in Abschnitt 3.2.5 vergleicht. Wegen (3.34) besteht zwischen beiden Korrelationslängen folgender Zusammenhang:

$$J_{\perp}\eta_{\perp}\xi_{||}^2 = J_{||}\eta_{||}\xi_{\perp}^2.$$

Dies bedeutet insbesondere, daß im Limes hoher Temperaturen, wenn also beide Vert-exparameter Eins werden,  $\xi_{||}^2/\xi_{\perp}^2 = J_{||}/J_{\perp}$  gilt.

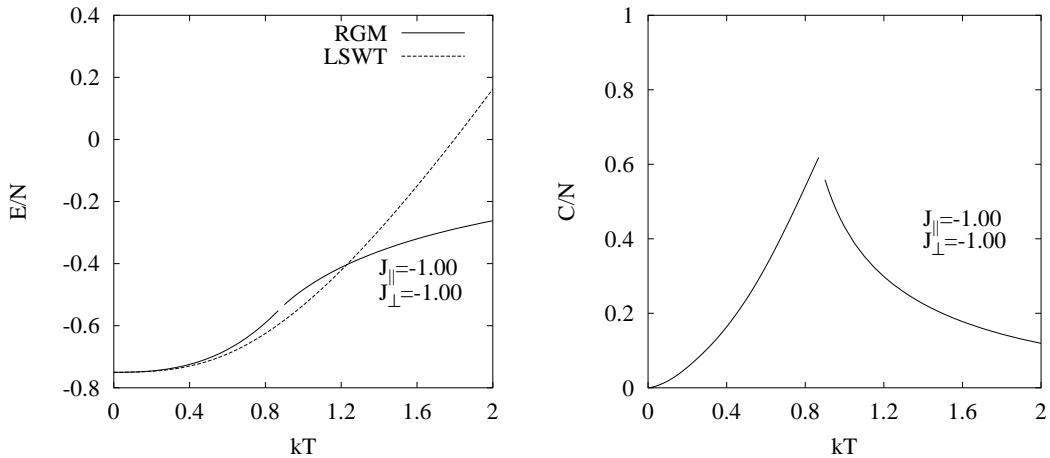


Abbildung 3.2: RGM: Die innere Energie (links) als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{||} = J_{\perp} = -1.00$ . Zum Vergleich dient das entsprechende Spinwellenresultat für  $s = 1/2$ . Die spezifische Wärme (rechts) als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{||} = J_{\perp} = -1.00$ .

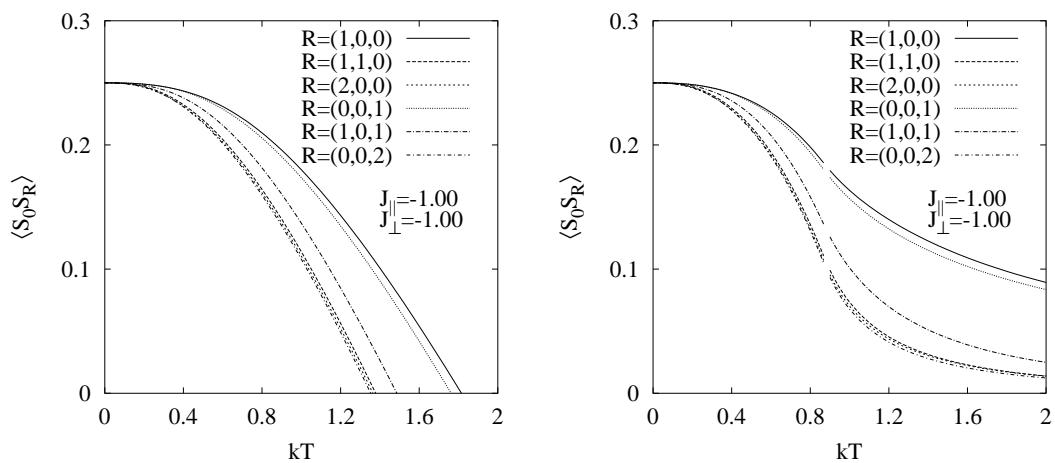


Abbildung 3.3: LSWT (links) für  $s = 1/2$  und RGM (rechts): Verschiedene Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von der Temperatur  $kT$  für  $J_{||} = J_{\perp} = -1.00$ .

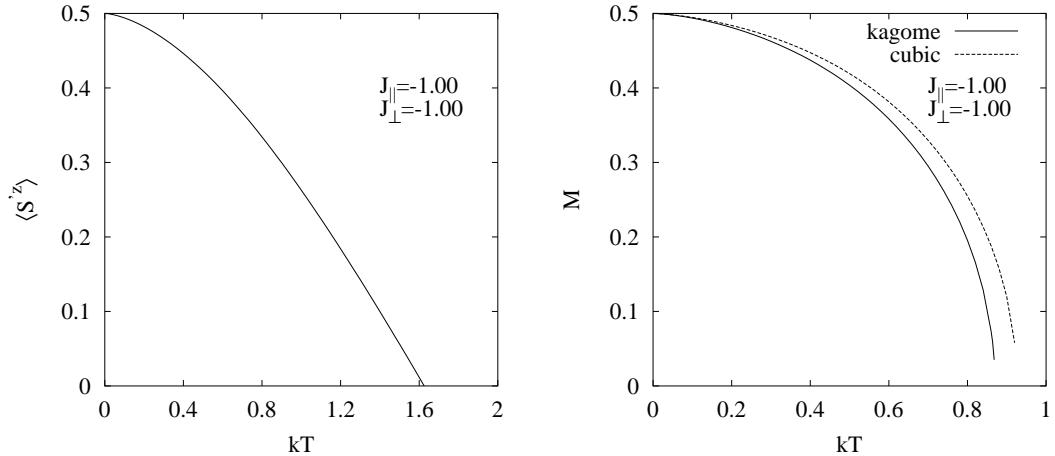


Abbildung 3.4: LSWT (links) für  $s = 1/2$  und RGM (rechts): Die Ordnungsparameter als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = J_{\perp} = -1.00$ . Dem direkten Vergleich dient die Magnetisierungskurve des Ferromagneten auf dem kubischen Gitter bei identischem Parametersatz.

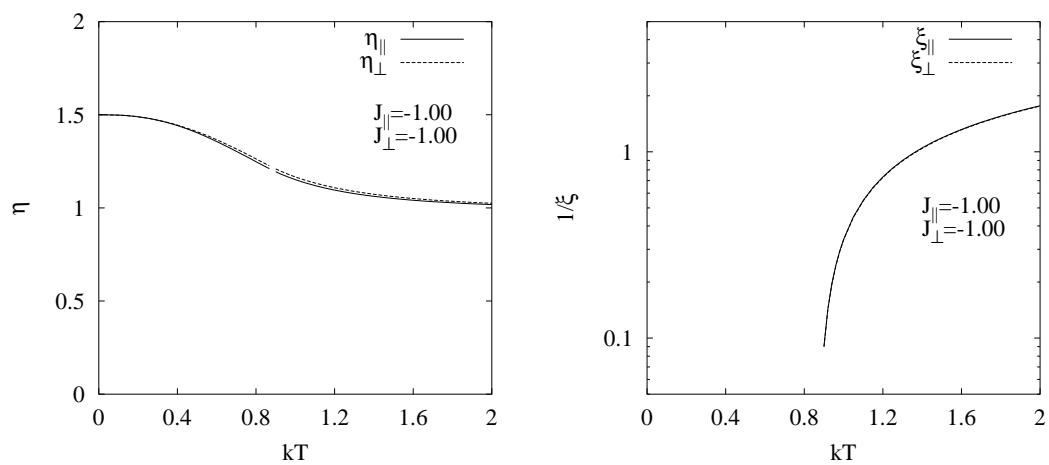


Abbildung 3.5: RGM: Die Vertexparameter (links) und die inversen Korrelationslängen (rechts) als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = J_{\perp} = -1.00$ . Wegen  $\eta_{\parallel} \approx \eta_{\perp}$  im gesamten Temperaturbereich sowie  $J_{\parallel} = J_{\perp}$  differiert  $\xi_{\parallel}$  aufgrund der Beziehung  $J_{\perp}\eta_{\perp}\xi_{\parallel}^2 = J_{\parallel}\eta_{\parallel}\xi_{\perp}^2$  nur unmerklich von  $\xi_{\perp}$ .

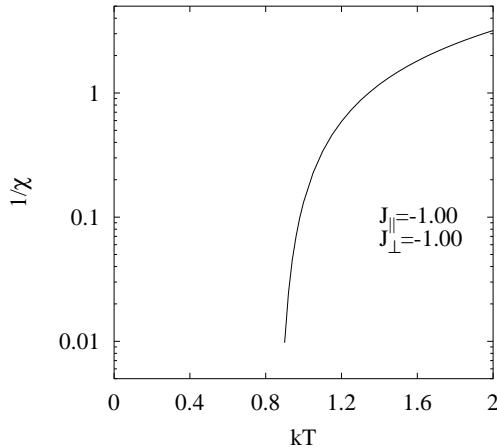


Abbildung 3.6: RGM: Die inverse uniforme statische Suszeptibilität als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = J_{\perp} = -1.00$ .

Um die offensichtlichen Vorteile der RGM gegenüber der LSWT zu demonstrieren, sind die selbstkonsistenten Gleichungen für den Parametersatz  $J_{\parallel} = J_{\perp} = -1.00$  gelöst worden. Bei hinreichend kleinen Temperaturen ist die Übereinstimmung zwischen dieser Methode und der Spinwellentheorie noch gut. Augenfällig wird diese Tatsache bei der inneren Energie in Abb. 3.2 und bei den Korrelationsfunktionen in Abb. 3.3. Während aber die LSWT für höhere Temperaturen komplett versagt, weil die Vorstellung angeregter Magnonen eben nur für tiefe Temperaturen zutrifft, liefert die RGM ein physikalisch konsistentes Bild. Erwartungsgemäß gibt es nach Abb. 3.4 eine eindeutig definierte Übergangstemperatur  $kT_C \approx 0.87$ , unterhalb der magnetische Ordnung vorliegt und die Magnetisierung  $M$  von Null verschieden ist. Dicht unterhalb von  $kT_C$  genügt die Magnetisierung der Beziehung  $M \sim \sqrt{T_C - T}$ . Die Übergangstemperatur ist eine Funktion von  $J_{\perp}$ . Entsprechend des Mermin-Wagner-Theorems wird sie Null, falls  $J_{\perp}$  gegen Null geht. Allerdings gestaltet sich die Numerik in der Nähe des Überganges als schwierig zu handhaben. Die Lücken in den Diagrammen in der Umgebung von  $kT_C$  sind diesem Problem geschuldet. Frustration spielt auch beim Kagomé-Ferromagneten bei endlichen Temperaturen eine Rolle. Deshalb ist die Magnetisierung eines Ferromagneten auf dem kubischen Gitter bei gleichen Kopplungsverhältnissen und gleicher Koordinationszahl  $z = 6$  stets größer als die des Kagomé-Ferromagneten. Nach Abb. 3.4 liegt die Übergangstemperatur des kubischen Ferromagneten bei  $kT_C \approx 0.93$ . Der Übergang, der sich bei  $kT_C$  vollzieht, ist ein Phasenübergang zweiter Art. Ein damit verbundener Sprung in der spezifischen Wärme, wie ihn die Landau-Theorie liefert, wird von der Theorie augenscheinlich nicht reproduziert. Beide Kurvenzweige in Abb. 3.2 scheinen sich in der Verlängerung am Übergangspunkt zu schneiden. Aufgrund der numerischen Schwierigkeiten ist eine endgültige Aussage diesbezüglich nicht möglich. Die uniforme statische Suszeptibilität  $\chi$  in Abb. 3.6 sowie die Korrelationslängen in Abb. 3.5 sind unendlich, solange man sich in der geordneten Phase befindet. Oberhalb von  $kT_C$  werden sie endlich und

<sup>38</sup>Im Zähler von (3.50) und (3.51) stehen die jeweilige Kopplung, der Korrelator zum nächsten Nachbarn sowie der Faktor 2. Die Nenner sind durch die dazugehörigen Kondensatbedingungen gekennzeichnet.

gehen für hohe Temperaturen gegen Null, wobei gleichzeitig die Vertexparameter gemäß Abb. 3.5 rasch gegen Eins streben. Hervorzuheben ist der Umstand, daß mit  $J_{||}, J_{\perp} < 0$  im Unterschied zu den übrigen Fällen, die im Anschluß untersucht werden, keinerlei prinzipielle Probleme auftreten, die das Auffinden von sinnvollen Lösungen, deren Existenz und Eindeutigkeit betreffen. Offenkundig ist die Beschreibung des reinen Ferromagneten im Rahmen einer Minimalversion der RGM mit nur zwei zu unterscheidenden Vertexparametern angemessen und ausreichend. Das eigentlich willkürliche Gleichsetzen der  $\eta$  beim Entkoppeln und die damit verbundene Gleichbehandlung unterschiedlicher Korrelatoren scheint physikalisch gerechtfertigt zu sein<sup>39</sup>.

**Fazit:** RGM und LSWT beschreiben beide den Grundzustand exakt. Während jedoch die LSWT bei endlichen Temperaturen ihre Gültigkeit verliert, liefert die RGM ein einfaches, physikalisch vernünftiges Bild. Es existiert eine Übergangstemperatur  $kT_C$ . Dort vollzieht sich ein Phasenübergang zweiter Art von der ferromagnetisch geordneten Phase hin zu einer thermisch ungeordneten, paramagnetischen Phase. Aus  $J_{\perp} \rightarrow 0$  folgt in Einklang mit dem Mermin-Wagner-Theorem  $kT_C \rightarrow 0$ .

### 3.3.2 Der Fall $J_{||} < 0, J_{\perp} > 0$

Der klassische Grundzustand ist auch in diesem Fall sehr einfach. Alle Spins innerhalb einer Ebene sind parallel ausgerichtet. In die entgegengesetzte Richtung weisen die Spins der benachbarten Ebenen, so daß die magnetische Ordnung durch  $\mathbf{Q} = (0, 0, \pi)$  beschrieben wird.

**Lineare Spinwellentheorie für  $J_{||} < 0$  und  $J_{\perp} > 0$ :** Der zu diagonalisierende bosonische Hamilton-Operator lautet nach (2.9)

$$\begin{aligned} H &= 2J_{||}Ns^2 - J_{\perp}Ns^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\ H_{\mathbf{q}} &= (-4J_{||}s + 2J_{\perp}s) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}}) \\ &\quad + 2J_{||}s \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+) \\ &\quad + 2J_{||}s \cos(\mathbf{qr}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+) \\ &\quad + 2J_{||}s \cos(\mathbf{qr}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+) \\ &\quad - J_{\perp}s \exp(-i\mathbf{qr}_3) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+) \\ &\quad - J_{\perp}s \exp(i\mathbf{qr}_3) (a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Ohne auf Details der Rechnung eingehen zu wollen, erhält man paarweise mit unterschiedlichen Vorzeichen die Pole bzw. Eigenwerte  $\pm\omega_{m\mathbf{q}}$  gemäß

$$\begin{aligned} \omega_{1\mathbf{q}} &= 2s \sqrt{(J_{\perp}(1 - \cos q_z) - 3J_{||})(J_{\perp}(1 + \cos q_z) - 3J_{||})}, \\ \omega_{2\mathbf{q}} &= s \sqrt{a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}}, \quad \omega_{3\mathbf{q}} = s \sqrt{a_{\mathbf{q}} - b_{\mathbf{q}}} \end{aligned} \quad (3.53)$$

---

<sup>39</sup>Der Zustand parallel ausgerichteter Spins ist sowohl klassisch als auch quantenmechanisch als einfacher Produktzustand derjenige mit der niedrigsten Energie. Das Ersetzen von Operatorprodukten durch Erwartungswerte ist deshalb exakt. Für endliche Temperaturen, wenn also das gesamte Spektrum des Hamilton-Operators in die Zustandssumme eingeht, gilt das jedoch nicht mehr.

mit

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{q}} &= J_{||}^2 \left( 18 + 16 \cos^4 \frac{q_y}{2} + 16 \cos^2 \frac{\sqrt{3}q_x}{2} \cos^2 \frac{q_y}{2} - 8 \cos^2 \frac{\sqrt{3}q_x}{2} - 24 \cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \\ &\quad + 4J_{\perp}^2 (1 - \cos^2 q_z) - 12 J_{||} J_{\perp}, \\ b_{\mathbf{q}} &= 2J_{||} (3J_{||} - 2J_{\perp}) D_{\mathbf{q}}, \end{aligned}$$

woraus sich die innere Energie zu

$$\begin{aligned} E &= (2J_{||} - J_{\perp}) N s (s+1) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^3 \omega_{m\mathbf{q}} \left( \frac{1}{\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.54)$$

ergibt. Bei genügend tiefen Temperaturen ist nur der akustische Zweig  $\omega_{3\mathbf{q}}$ , der sich in der Umgebung der Punkte  $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}$  wie  $2s\sqrt{-J_{||}J_{\perp}(q_x^2 + q_y^2) + J_{\perp}^2 q_z^2}$  verhält, angeregt. Entsprechend liefert die Auswertung der Integrale im thermodynamischen Limes

$$E = E_0 - \frac{N\sqrt{3}\pi^2}{180J_{||}J_{\perp}^2 s^3} (kT)^4 \quad (3.55)$$

bzw. die spezifische Wärme zu

$$\frac{C}{N} = -\frac{\sqrt{3}\pi^2}{45J_{||}J_{\perp}^2 s^3} (kT)^3. \quad (3.56)$$

Insofern genügen die innere Energie wie auch die spezifische Wärme im gesamten Parameterraum ( $J_{||}$  sowie  $J_{\perp}$  endlich und von Null verschieden) den typischen Potenzgesetzen für einen dreidimensionalen Antiferromagneten.

**Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für  $J_{||} < 0$  und  $J_{\perp} > 0$ :** Ausgangspunkt der Betrachtungen ist der Grundzustand, wenn  $J_{\perp}$  zusätzlich klein bleibt. Dann gibt es magnetische Fernordnung, und zwar mit  $\mathbf{Q} = (0, 0, \pi)$ . Diese Ordnung ist bis zu einem bestimmten  $J_{\perp}^C$  stabil. Natürlich existiert dann eine Temperatur  $kT_C$ , unterhalb der thermische Fluktuationen nicht in der Lage sind, diese Ordnung zu zerstören, solange  $J_{\perp} < J_{\perp}^C$  gilt. Fernordnung wird durch das zu lösende Gleichungssystem

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{qr}_1) + C_{13}, \quad c_{1,1,0} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}12} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) + C_{12}, \\ c_{2,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_1) + C_{11}, \quad c_{0,0,1} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i\mathbf{qr}_3) - C_{11}, \\ c_{1,0,1} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}13} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_3)) - C_{13}, \quad c_{0,0,2} = \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}11} \exp(-i2\mathbf{qr}_3) + C_{11}, \\ \frac{1}{2} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}11} + C_{11} \end{aligned} \quad (3.57)$$

beschrieben. Im Unterschied zu (3.40) gehen wegen (3.13) und  $\mathbf{Q} \neq \mathbf{0}$  einige Kondensatsterme mit einem anderen Vorzeichen in die Gleichungen ein. Die Kondensatbedingung

$$J_{\perp} (1 + 2\eta_{\perp} (c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) + 8J_{||}\eta_{\perp} (c_{1,0,1} - c_{0,0,1})) = 0 \quad (3.58)$$

leitet sich aus dem Grenzwert  $\lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  ab, wobei die Reihenfolge der Grenzwertbildung in  $\mathbf{q}$  beliebig ist. Entsprechend ergeben sich später die Korrelationslängen aus der Untersuchung des Eigenwertes  $G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  in diesem Limes. Zusätzlich ist natürlich die Gültigkeit von (3.34) zu fordern. Ansonsten werden noch zwei weitere Gleichungen benötigt, die die Kondensatterme zueinander ins Verhältnis setzen. Aus (3.25) unter Beachtung von (3.58) folgt genauso wie beim puren Ferromagneten

$$C_{11} = C_{12} = C_{13}. \quad (3.59)$$

Interessanterweise geht für  $J_{\perp} \rightarrow 0$  die Grundzustandslösung dieses Gleichungssystems asymptotisch gegen

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= c_{1,1,0} = c_{2,0,0} = c_{0,0,2} = \frac{1}{6}, \\ c_{0,0,1} &= c_{1,0,1} = -\frac{1}{6}, \\ \eta_{||} &= \eta_{\perp} = \frac{3}{2}, \\ C_{11} &= C_{12} = C_{13} = \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

Das Spinsystem verhält sich in diesem Limes klassisch. In den Kagomé-Ebenen formieren sich die Spins zu quasiklassischen Objekten. Effektiv koppeln somit makroskopische Spins in Kettenrichtung, so daß ein beliebig kleines  $J_{\perp}$  genügt, um für klassische Néel-Ordnung in Kettenrichtung zu sorgen. LSWT und RGM stimmen in dieser Hinsicht vollkommen überein. Den Übergang zu einem klassischen Spinsystem mit den entsprechenden Konsequenzen findet man auch im Fall  $J_{||} > 0$  und  $J_{\perp} < 0$  in Abschnitt 3.3.4. Verschwindet die magnetische Fernordnung - sei es durch zu großes  $J_{\perp}$  oder zu hohes  $kT$  -, so wird die Physik bekanntermaßen durch (3.34) und (3.44) erfaßt.

Anwenden von (A.6) auf  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{3\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  ergibt<sup>40</sup> folgende Beziehungen, denen die Korrelationslängen gehorchen:

$$\begin{aligned} \xi_{||}^2 &= \frac{-J_{||}a}{4J_{\perp}c_{0,0,1}(J_{\perp}(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) + 8J_{||}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})))}, \\ \xi_{\perp}^2 &= \frac{-2J_{\perp}\eta_{\perp}c_{0,0,1}}{J_{\perp}(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}) + 8J_{||}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1}))} \end{aligned} \quad (3.60)$$

mit

$$\begin{aligned} a &= J_{\perp}(c_{1,0,0}(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2})) \\ &- 4c_{0,0,1}(2\eta_{\perp}c_{0,0,1} + \eta_{\perp}c_{1,0,1} + \eta_{||}c_{1,0,0})) \\ &+ J_{||}(-c_{0,0,1}(1 - 2\eta_{||}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0,0})) \\ &+ 8\eta_{\perp}c_{1,0,0}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})), \end{aligned}$$

---

<sup>40</sup>Im Falle von Fernordnung divergiert dieser Eigenwert vermöge der erfüllten Kondensatbedingung in  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ .

so daß die Korrelationslängen solange entsprechend Abb. 3.12 divergieren, solange das Spinsystem ferngeordnet ist. Wenn magnetische Fernordnung existiert und deshalb die Kondensatbedingung erfüllt ist, dann wird  $\omega_{3q}$  nicht nur in  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  Null, sondern auch in  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ . Somit handelt es sich hier um ein Beispiel, wo die Existenz von Fernordnung zum Schließen einer Lücke im Spektrum führt. In Abb. 3.7 wird deutlich, daß sowohl LSWT als auch RGM einen Phasenübergang im Grundzustand beschreiben. Übersteigt  $J_\perp$  einen kritischen Wert  $J_\perp^C$ <sup>41</sup>, so verschwindet der Ordnungsparameter, wie man Abb. 3.7 entnehmen kann. Dabei unterscheiden sich die entsprechenden  $J_\perp^C$  ungefähr um eine Größenordnung (LSWT:  $J_\perp^C \approx -100J_{||}$ , RGM:  $J_\perp^C \approx -10J_{||}$ ). Das sich daraus ergebende, wenig konsistente Bild steht im Widerspruch zur ausgesprochen guten Übereinstimmung zwischen den dazugehörigen Grundzustandsenergien nach Abb. 3.9. Wie ist diese Diskrepanz zu beurteilen? Es ist dabei zunächst zu konstatieren, daß die RGM, indem sie die Rolle kurzreichweiter Korrelationen unterstreicht, tendenziell dazu neigt, magnetische Fernordnung zu unterschätzen. Ein gutes Beispiel dafür ist das  $J_1$ - $J_2$ -Modell auf dem Quadratgitter. Hier liefert die RGM selbst in einer verbesserten Variante mit  $(J_2/J_1)_{C_1} = 0.24$  und  $(J_2/J_1)_{C_2} = 0.83$  einen zu großen Bereich für die Spinflüssigkeitsphase [31]. Auch im Falle des HAFM auf dem Quadratgitter ergibt die RGM in ihrer Minimalversion mit einem Vertexparameter eine Magnetisierung, die mit  $M = 0.1494$  [80] deutlich geringer als das gut bestätigte Spinwellenresultat von  $M = 0.3034$  ausfällt. In diesen Kontext paßt somit die Tatsache, daß die kritische Kopplung innerhalb der RGM kleiner als die kritische Kopplung innerhalb der LSWT ausfällt. Daß der Ordnungsparameter mit wachsendem  $J_\perp$  abnehmen muß, ist natürlich plausibel, weil dann die Kettenbeiträge zunehmend dominieren. Der HAFM auf der linearen Kette als Grenzfall ist bekanntlich nicht ferngeordnet. Allerdings ergibt sich aus der exakten Bethe-Lösung für diesen Fall auch, daß die Korrelationsfunktionen nicht exponentiell mit dem Abstand abnehmen, sondern nach einem Potenzgesetz mit einer unendlichen Korrelationslänge<sup>42</sup>. Der Grundzustand ist in diesem Limes quantenkritisch. Eine beliebig kleine Kopplung zwischen ungeordneten Ketten genügt [15], um spontan einen geordneten Grundzustand mit einem von Null verschiedenen Ordnungsparameter zu erhalten. Offensichtlich kann auch die LSWT dieses Verhalten nicht reproduzieren, denn dieser Argumentation folgend, sollte  $J_\perp^C$  gegen Unendlich streben. Es ließe sich jetzt argumentieren, daß das Verschwinden des Ordnungsparameters bei einem endlichen  $J_\perp^C$  mit der Gitterstruktur in Zusammenhang steht. Daß ein anderes Spinsystem mit einer einfacheren Gitterstruktur im Rahmen der LSWT ebenfalls kritische Kopplungsstärken besitzt, illustriert das Beispiel des Quadratgitters mit modifizierten Kopplungen im Anhang B. Wenn aber schon die LSWT, die eigentlich genau dann gute Resultate liefert, wenn Fernordnung vorliegt, solche, womöglich der physikalischen Realität widersprechenden Aussagen trifft, wie kann man dann von der RGM erwarten, daß sie geordnete Strukturen besser beschreibt? Die Vorteile der RGM liegen bekanntlich verstärkt in dem Bereich endlicher Temperaturen, wenn also kurzreichweite Korrelationen tatsächlich die Physik bestimmen. Zusammenfassend ist der Autor deshalb geneigt, die Existenz endlicher  $J_\perp^C$  als Artefakte beider Theorien einzustufen. Sie scheinen der Tatsache geschuldet zu sein, daß sich ausgesprochen diffiziles Verhalten - wie das des HAFM auf der linearen Kette - einer Beschreibung mit relativ allgemeinen Methoden entzieht. Zur LSWT ist

---

<sup>41</sup>In der RGM öffnet sich oberhalb  $J_\perp^C$  die Lücke im Spektrum wieder.

<sup>42</sup>Die Argumentation bezieht sich auf  $s = 1/2$ .

noch anzumerken, daß, bevor die Magnetisierung als Ordnungsparameter Null wird, bereits einige Korrelationsfunktionen das falsche Vorzeichen bekommen. Deshalb ist die RGM die konsistenter Theorie. Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergänge können durch die LSWT nicht widerspruchsfrei definiert werden.

Für den Bereich  $0.75 \lesssim -J_{\perp}/J_{\parallel} \lesssim 0.88$  finden sich im Grundzustand keine Lösungen innerhalb der RGM<sup>43</sup>. Während der Verlauf der Vertexparameter in der Umgebung dieses Bereiches nach Abb. 3.13 schwer zu interpretieren ist, sind die Energie in Abb. 3.9, die Korrelationsfunktionen in Abb. 3.10 sowie die uniforme statische Suszeptibilität in Abb. 3.11 in gewisser Weise stetige Größen, d.h. die entstandene Lücke ließe sich einfach unter Verwendung eines Kurvenlineals schließen bzw. per Hand ergänzen. Auf das Auftreten von Parameterbereichen ohne Lösung in Verbindung mit der Zuordnung der Vertexparameter wird in den folgenden Abschnitten näher eingegangen.

Wendet man sich endlichen Temperaturen zu, so sind zwei Szenarien denkbar. Ist das betrachtete  $J_{\perp}$  im Verhältnis zu  $J_{\parallel}$  bereits so groß, daß selbst im Grundzustand keine Fernordnung vorliegt, so wird Fernordnung bei einem  $kT$ , das von Null verschieden ist, erst recht nicht auftreten.  $J_{\perp}$  frustriert das Spinsystem nicht. Ist im Gegensatz dazu das verwendete  $J_{\perp}$  kleiner als  $J_{\perp}^C$  bei festem  $J_{\parallel}$ , so existiert eine kritische Temperatur  $kT_C$ , oberhalb der die magnetische Fernordnung verschwindet. Es kommt zu einem Phasenübergang zweiter Art. Anhand der Wahl des Parametersatzes  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$  soll diese Situation illustriert werden. Dann ergibt sich  $kT_C \approx 1.57$ . Falls  $J_{\perp}$  gegen Null oder gegen  $J_{\perp}^C$  strebt, so folgt daraus  $kT_C \rightarrow 0$ . Es sollte also ein bestimmtes  $J_{\perp}$  existieren, wo die magnetische Ordnung am stabilsten ist und  $kT_C$  ein Maximum besitzt. In der Umgebung des Phasenüberganges gibt es numerische Probleme. Der Phasenübergangspunkt kann daher nur näherungsweise aus der Interpolation des Ordnungsparameters gewonnen werden. Wegen auftretender Konvergenzprobleme beim Integrieren in der Umgebung von  $kT_C$  sind diese Daten aber nicht hinreichend genau genug, um über  $kT_C$  hinaus auch noch den kritischen Exponenten verlässlich bestimmen zu können. Aus den verfügbaren Daten ergibt sich ein Exponent, der dem Wert  $1/2$  ziemlich nahe kommt. Die spezifische Wärme in Abb. 3.8 hat am Übergangspunkt keinen Sprung, sondern einen Knick. Sie gehorcht im Tieftemperaturregime unabhängig davon, ob der Grundzustand geordnet oder ungeordnet ist<sup>44</sup>, einem  $T^3$ -Gesetz; hierin stimmen RGM und LSWT überein. Mit welcher Potenz  $kT$  in führender Ordnung in den Tieftemperaturlösungen auftritt, ist den Gleichungen anzusehen. Auf diesbezügliche Details im Umgang mit diesen Gleichungen wird im folgenden Abschnitt eingegangen.

**Fazit:** RGM und LSWT sagen übereinstimmend einen geordneten Grundzustand voraus, der allerdings ab einem kritischen  $J_{\perp}^C$  bei festem  $J_{\parallel}$  in eine ungeordnete Phase übergeht. Dabei differieren die ermittelten  $J_{\perp}^C$  in Abhängigkeit von der benutzten Theorie um eine Größenordnung. Es gibt jedoch qualitative Anhaltspunkte dafür, daß die gefundenen Übergänge als Artefakte einzurufen sind, weil weder die LSWT noch die RGM den Limes  $J_{\perp} \rightarrow \infty$ , also den HAFM auf der linearen Kette, adäquat in all seiner Komplexität beschreiben können, zumal die RGM zusätzlich Fernordnung

---

<sup>43</sup>Auch bei endlichen Temperaturen gibt es solche Bereiche insbesondere dann, wenn  $J_{\perp} < |J_{\parallel}|$  gilt.

<sup>44</sup>Für  $J_{\perp} < J_{\perp}^C$  ist bei tiefen Temperaturen  $\omega_{3q}$  in  $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}$  angeregt. Gilt dagegen  $J_{\perp} > J_{\perp}^C$ , so trifft das nur noch für  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  zu.

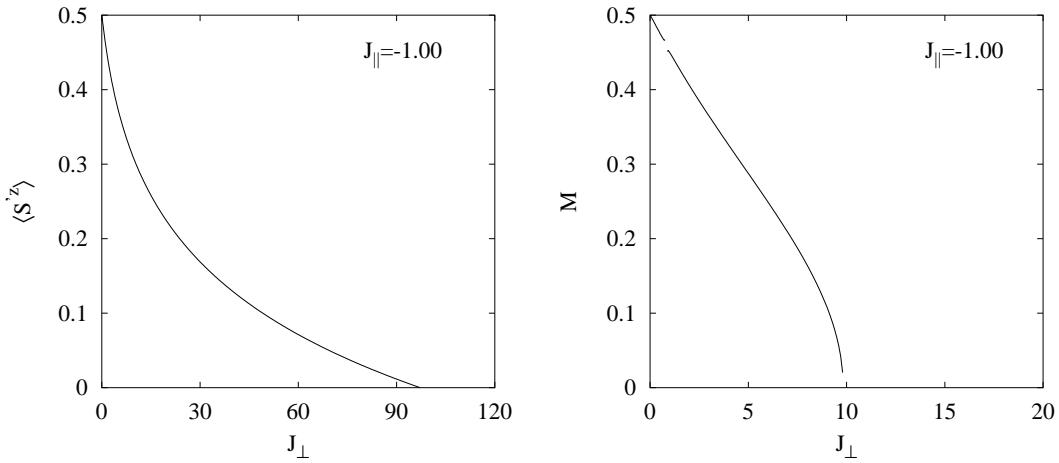


Abbildung 3.7: LSWT für  $s = 1/2$  (links) und RGM (rechts): Die Ordnungsparameter als Funktionen von  $J_{\perp}$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $kT = 0.00$ .

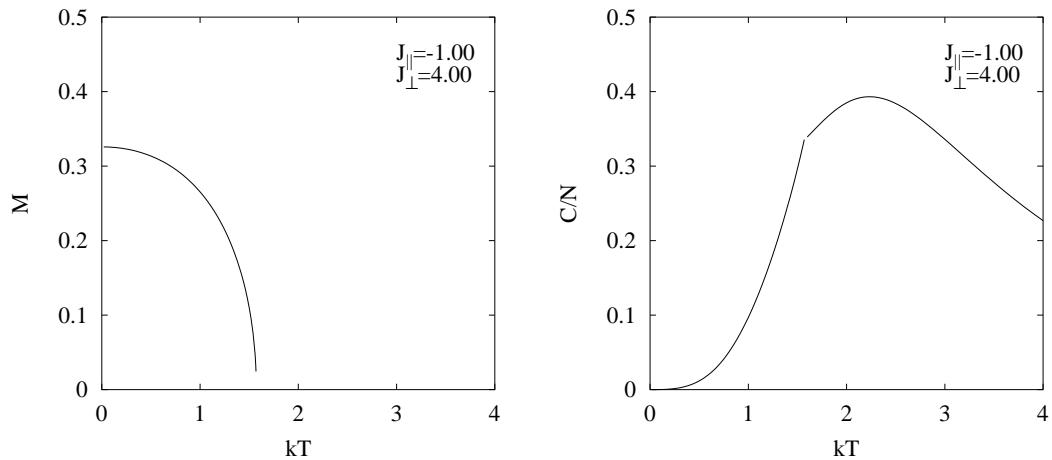


Abbildung 3.8: RGM: Der Ordnungsparameter (links) und die spezifische Wärme (rechts) als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$ .

unterschätzt. Dagegen nähern sich im Limes  $J_{\perp} \rightarrow 0$  sowohl LSWT als auch RGM in gleicher Weise asymptotisch dem exakten Resultat. Die Grundzustandsenergien sind z.B. dann nicht voneinander zu unterscheiden. Statt eines Sprunges besitzt die spezifische Wärme am Übergang einen Knick. Sie ist für kleine  $kT$  der dritten Potenz der Temperatur proportional.

### 3.3.3 Der Fall $J_{\parallel} > 0, J_{\perp} > 0$

Der klassische Grundzustand des HAFM auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter ist bekanntlich hochgradig entartet. Daran ändert auch die zusätzliche Einführung von  $J_{\perp}$  nichts. Es gibt keinen ordnungsbeschreibenden Vektor  $\mathbf{Q}$ .

**Lineare Spinwellentheorie für  $J_{\parallel} > 0$  und  $J_{\perp} > 0$ :** Als bosonischer Hamilton-

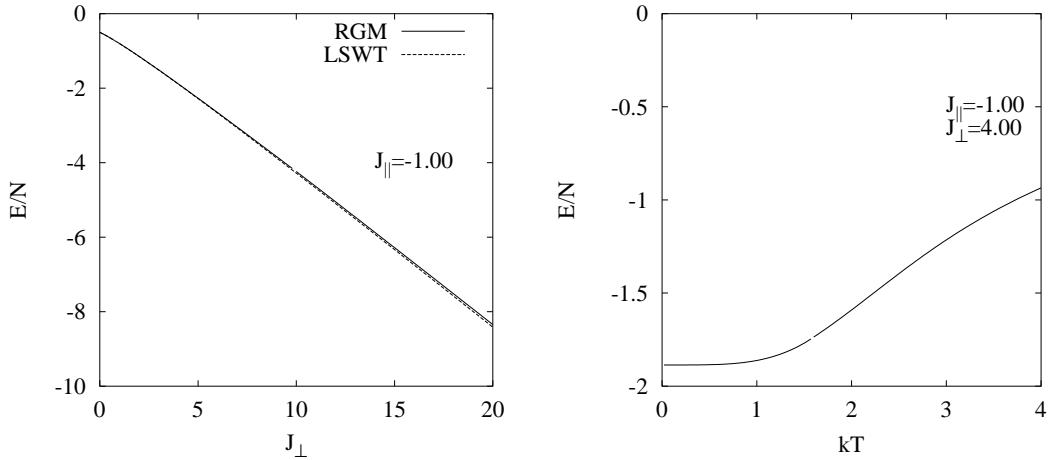


Abbildung 3.9: RGM: Die Grundzustandsenergie (links) über  $J_{\perp}$  im Vergleich mit dem entsprechenden Spinwellenresultat für  $s = 1/2$  und  $J_{\parallel} = -1.00$ . Die innere Energie (rechts) als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$ .

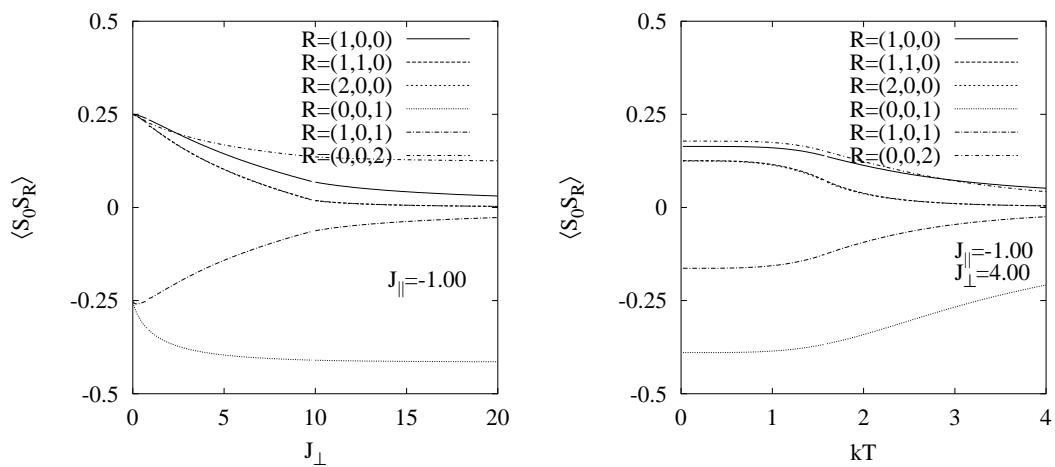


Abbildung 3.10: RGM: Verschiedene Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von  $J_{\perp}$  mit  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $kT = 0.00$  (links) sowie in Abhängigkeit von der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$  (rechts).

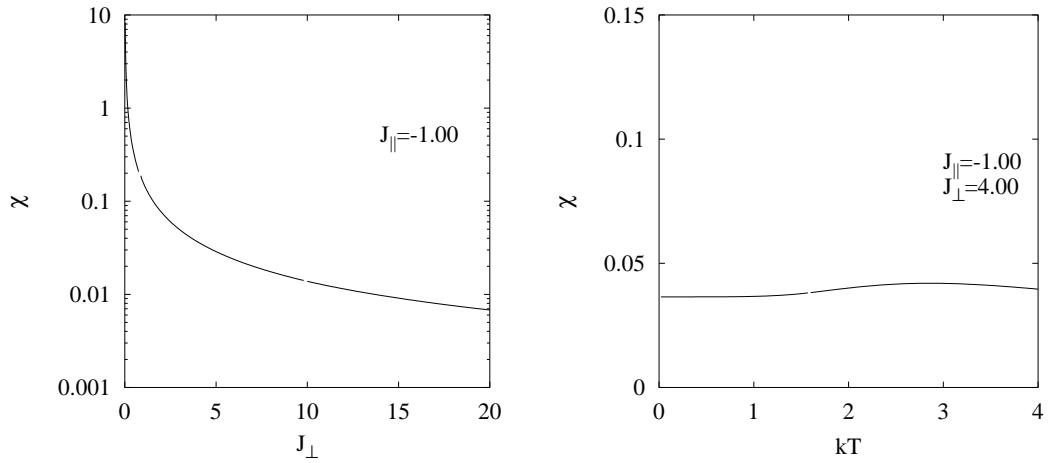


Abbildung 3.11: RGM: Die uniforme statische Suszeptibilität im Grundzustand als Funktion von  $J_{\perp}$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  (links) sowie als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$  (rechts).

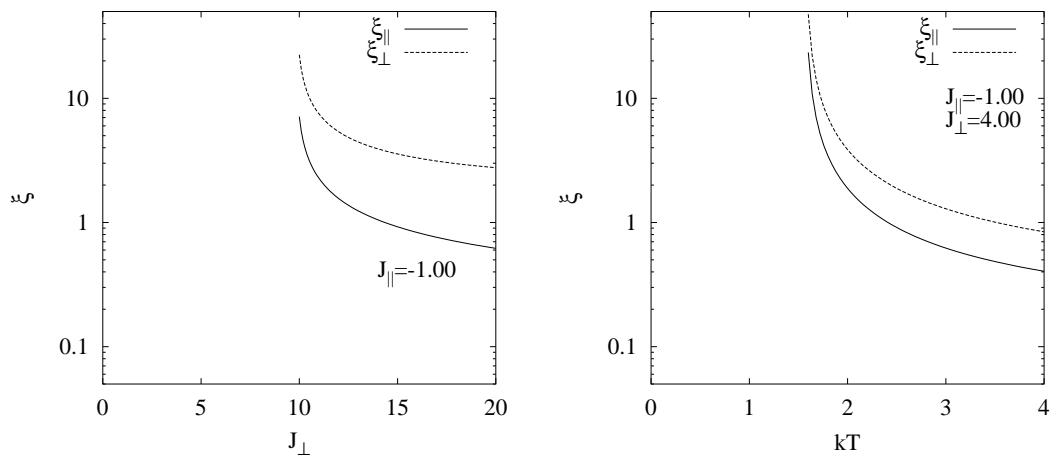


Abbildung 3.12: RGM: Die Korrelationslängen im Grundzustand als Funktionen von  $J_{\perp}$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  (links) sowie als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$  (rechts).

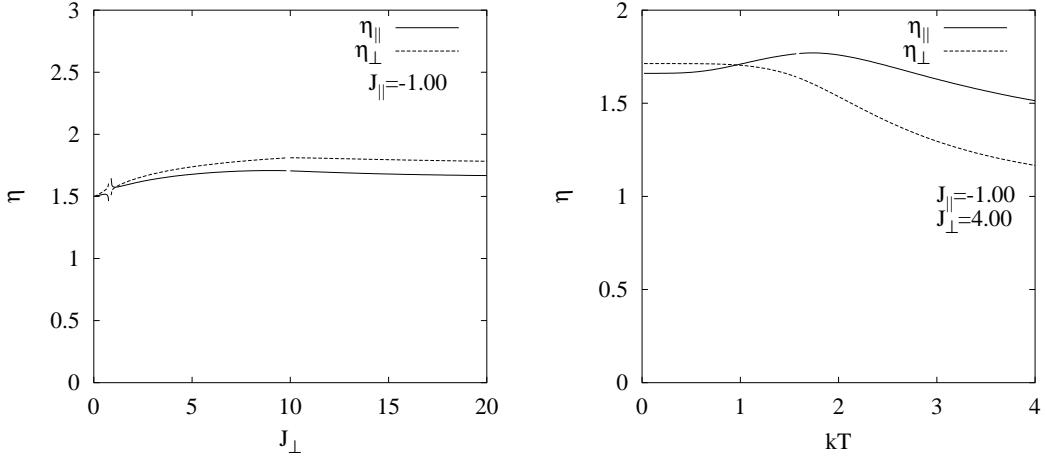


Abbildung 3.13: RGM: Die Vertexparameter im Grundzustand als Funktionen von  $J_{\perp}$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  (links) sowie als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = -1.00$  und  $J_{\perp} = 4.00$  (rechts).

Operator findet sich nach (2.9)

$$\begin{aligned}
 H &= -J_{\parallel}Ns^2 - J_{\perp}Ns^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\
 H_{\mathbf{q}} &= (2J_{\parallel}s + 2J_{\perp}s) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}}) \\
 &\quad - \frac{3J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}}) \\
 &\quad - \frac{3J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{qr}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) \\
 &\quad - \frac{3J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{qr}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}) \\
 &\quad + \frac{J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+) \\
 &\quad + \frac{J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{qr}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+) \\
 &\quad + \frac{J_{\parallel}s}{2} \cos(\mathbf{qr}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+) \\
 &\quad - J_{\perp}s \exp(-i\mathbf{qr}_3) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+) \\
 &\quad - J_{\perp}s \exp(i\mathbf{qr}_3) (a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}).
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Aus ihm lassen sich leicht die Dispersionsrelationen ableiten:

$$\begin{aligned}
 \omega_{1\mathbf{q}} &= s \sqrt{4J_{\perp}^2 (1 - \cos^2 q_z) + 6J_{\parallel}J_{\perp}(1 + \cos q_z)}, \\
 \omega_{2\mathbf{q}} &= s \sqrt{a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}}, \quad \omega_{3\mathbf{q}} = s \sqrt{a_{\mathbf{q}} - b_{\mathbf{q}}}
 \end{aligned} \tag{3.62}$$

mit

$$a_{\mathbf{q}} = 4J_{\parallel}^2 \left( 2 \cos^2 \frac{q_y}{2} + \left( \cos^2 \frac{\sqrt{3}q_x}{2} + \cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \left( 1 - 2 \cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \right)$$

$$\begin{aligned}
& + 4J_{\perp}^2 (1 - \cos^2 q_z) + 3J_{\parallel}J_{\perp} (3 - \cos q_z), \\
b_{\mathbf{q}} & = J_{\parallel}J_{\perp} (1 - 3 \cos q_z) D_{\mathbf{q}}.
\end{aligned}$$

Für  $q_z = \pi$  beschreibt  $\omega_{1\mathbf{q}}$  eine flache Nullmode. In der Umgebung von  $q_z = \pi$  genügt sie näherungsweise der Beziehung

$$\omega_{1\mathbf{q}} \approx s \sqrt{4J_{\perp}^2 + 3J_{\parallel}J_{\perp}} |q_z|.$$

Diese Mode liefert in führender Ordnung eine quadratische Temperaturabhängigkeit der inneren Energie. Dagegen erweisen sich die Beiträge von  $\omega_{2\mathbf{q}}$  sowie  $\omega_{3\mathbf{q}}$  mit

$$\omega_{2\mathbf{q}} \approx s \sqrt{(3J_{\parallel}^2 + 2J_{\parallel}J_{\perp}) (q_x^2 + q_y^2) + (4J_{\perp}^2 + 6J_{\parallel}J_{\perp}) q_z^2}$$

in der Umgebung von  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  und

$$\omega_{3\mathbf{q}} \approx s \sqrt{(3J_{\parallel}^2 + 4J_{\parallel}J_{\perp}) (q_x^2 + q_y^2) + (4J_{\perp}^2 + 3J_{\parallel}J_{\perp}) q_z^2}$$

in der Umgebung von  $\mathbf{q} = (0, 0, \pi)$  als für das Tieftemperaturverhalten unerheblich. Beide Zweige entarten, falls  $q_z = \arccos 1/3$  gilt. Aus

$$\begin{aligned}
E & = - (J_{\parallel} + J_{\perp}) N s (s+1) \\
& + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^3 \omega_{m\mathbf{q}} \left( \frac{1}{\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT)} - 1 \right) + \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{3.63}$$

folgt für tiefe Temperaturen im thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned}
E & = E_0 + \frac{N\pi}{18s\sqrt{4J_{\perp}^2 + 3J_{\parallel}J_{\perp}}} (kT)^2, \\
\frac{C}{N} & = \frac{\pi}{9s\sqrt{4J_{\perp}^2 + 3J_{\parallel}J_{\perp}}} kT.
\end{aligned} \tag{3.64}$$

Es gibt im Rahmen der LSWT keine langreichweite Ordnung. Wegen der flachen Nullmode  $\omega_{1\mathbf{q}}$  und der Entartung von  $\omega_{2\mathbf{q}}$  und  $\omega_{3\mathbf{q}}$  für  $q_z = \pi$  respektive  $q_z = \arccos 1/3$  divergieren die beteiligte Summen/Integrale. Die spezifische Wärme hat nicht die richtige Temperaturabhängigkeit für kleine  $kT$ .

**Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für  $J_{\parallel} > 0$  und  $J_{\perp} > 0$ :** Bei der Auswertung der Gleichungen zeigt sich, daß sowohl im Grundzustand als auch bei endlichen Temperaturen nur solche Lösungen existieren, die kein Kondensat besitzen. Langreichweite Ordnung kommt demnach in keinem Fall zustande. Zu lösen ist das Gleichungssystem (3.44) zusammen mit (3.34). Da es keinen magnetischen Ordnungsvektor gibt, sind die Eigenwerte  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{j\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  zur Bestimmung der Korrelationslängen auf ihre Extremwerte hin zu untersuchen. Bei  $G_{2\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  handelt es sich um den gesuchten Eigenwert. Er besitzt das absolute Minimum bei  $\mathbf{q} = (0, 0, \pi)$ .

Anwenden von (A.6) ergibt

$$\begin{aligned}
\xi_{\parallel}^2 &= -J_{\parallel}(18J_{\parallel}^2\eta_{\parallel}c_{1,0,0}^2 + J_{\perp}^2(4c_{0,0,1}(\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + \eta_{\perp}c_{1,0,1}) + 8\eta_{\perp}c_{0,0,1}^2 \\
&\quad - c_{1,0,0}(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2})) + J_{\parallel}J_{\perp}(8\eta_{\perp}c_{1,0,0}(c_{0,0,1} - c_{1,0,1}) \\
&\quad + c_{0,0,1}(1 + 2\eta_{\parallel}(8c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}))) / ((3J_{\parallel}c_{1,0,0} + 2J_{\perp}c_{0,0,1}) \times \\
&\quad (3J_{\parallel}^2(1 + 2\eta_{\parallel}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 2J_{\perp}^2(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2}))) \\
&\quad + J_{\parallel}J_{\perp}(12\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + 8\eta_{\perp}c_{0,0,1} + 28\eta_{\perp}c_{1,0,1})), \\
\xi_{\perp}^2 &= -J_{\perp}(J_{\parallel}^2(-3c_{0,0,1}(1 + 2\eta_{\parallel}(2c_{1,0,0} + c_{1,0,1} + c_{2,0,0})) \\
&\quad + 36\eta_{\parallel}c_{1,0,0}^2 + 12\eta_{\perp}c_{1,0,0}(c_{0,0,1} + 2c_{1,0,1})) + 16J_{\perp}^2c_{0,0,1}^2 \\
&\quad + J_{\parallel}J_{\perp}(3c_{1,0,0}(1 + 4\eta_{\parallel}c_{0,0,1} + 2\eta_{\perp}c_{0,0,2}) + 6\eta_{\perp}(5c_{1,0,0} - 2c_{1,0,1})) / (2 \times \\
&\quad (3J_{\parallel}c_{1,0,0} + 2J_{\perp}c_{0,0,1})(3J_{\parallel}^2(1 + 2\eta_{\parallel}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) \\
&\quad + 2J_{\perp}^2(1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2})) + J_{\parallel}J_{\perp}(12\eta_{\parallel}c_{1,0,0} + 8\eta_{\perp}c_{0,0,1} + 28\eta_{\perp}c_{1,0,1})). 
\end{aligned} \tag{3.65}$$

Untersucht man obige Beziehungen in den Grenzen  $J_{\perp} = 0$  bzw.  $J_{\parallel} = 0$ , so erhält man

$$\xi_{\parallel}^2 = \frac{-2\eta_{\parallel}c_{1,0,0}}{1 + 2\eta_{\parallel}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})}, \quad \xi_{\perp}^2 = 0$$

für  $J_{\perp} = 0$  sowie

$$\xi_{\parallel}^2 = 0, \quad \xi_{\perp}^2 = \frac{-2\eta_{\perp}c_{0,0,1}}{1 + 2\eta_{\perp}(c_{0,0,1} + c_{0,0,2})}$$

für  $J_{\parallel} = 0$ . In Abb. 3.15 sind die Korrelationslängen im Grundzustand über  $J_{\perp}$  aufgetragen. Sie besitzen ein Maximum in der Umgebung von  $J_{\perp} \approx J_{\parallel}$ . Offenbar bewirkt die zusätzliche Kopplung  $J_{\perp}$  zunächst ordnende Tendenzen im Spinsystem, um aber sehr bald die dominierende Wechselwirkung schlechthin zu werden. So hängt die Grundzustandsenergie für  $J_{\perp} > J_{\parallel}$  in Abb. 3.14 linear von  $J_{\perp}$  ab, wobei die Übereinstimmung mit der eigentlich für ungeeignet befundenen LSWT<sup>45</sup> überraschend gut ist. Genau diesem Bild entsprechen auch die Korrelationsfunktionen sowie die Vertexparameter, die selbstkonsistent zu bestimmen waren. Die korrespondierenden Lösungen für den HAFM auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter gehen nahtlos und sehr rasch in diejenigen für den HAFM auf der linearen Kette über, was man Abb. 3.14 und Abb. 3.15 entnehmen kann. Mit wachsendem  $J_{\perp}$  nimmt die uniforme statische Suszeptibilität  $\chi$  nach Abb. 3.16 stetig ab. Gemäß (3.35) gilt  $\chi \sim 1/J_{\perp}$  für hinreichend große  $J_{\perp}$ . Es soll sich nun explizit der Problematik endlicher Temperaturen zugewandt werden, wobei zunächst die betrachteten Temperaturen klein gegenüber den wirkenden Kopplungen sein sollen. Von Interesse ist die Tieftemperaturentwicklung der spezifischen Wärme. Auf die Numerik ist in diesem Fall kein Verlaß, da sich die Energie nur schwach mit der Temperatur ändert. Etwaig geltende Potenzgesetze sind numerisch daher nur schwer zu verifizieren. Insofern bietet sich eine Tieftemperaturentwicklung des gesamten Gleichungssystems als analytischer Ausweg an. Exemplarisch erfolgt nun die Ableitung der Tieftemperaturkorrektur für den Korrelator  $c_{1,0,0}$ . Zunächst einmal gilt wegen

---

<sup>45</sup>Die Energie ist mit den für sie relevanten Nachbarkorrelationen unempfindlich gegenüber der Existenz oder Nichtexistenz von Fernordnung.

(3.16) sowie (3.44)

$$\begin{aligned} c_{1,0,0} &= \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^3 \frac{m_{j\mathbf{q}}}{2\omega_{j\mathbf{q}}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|3\rangle \exp(-i\mathbf{qr}_1) \\ &+ \frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^3 \frac{m_{j\mathbf{q}}}{\omega_{j\mathbf{q}}} n(\omega_{j\mathbf{q}}) \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|3\rangle \exp(-i\mathbf{qr}_1). \end{aligned}$$

Der zweite Summand trägt explizit über den Faktor  $n(\omega_{j\mathbf{q}})$  die Temperaturabhängigkeit in sich. Jetzt ist zu beachten, daß  $\omega_{3\mathbf{q}}$  die einzige akustische Mode für  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  liefert. Bedeutende Beiträge zur Summe für tiefe Temperaturen werden also durch

$$\frac{3}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{m_{3\mathbf{q}}}{\omega_{3\mathbf{q}}} n(\omega_{3\mathbf{q}}) \langle 1|3\mathbf{q}\rangle \langle 3\mathbf{q}|3\rangle \exp(-i\mathbf{qr}_1)$$

bestimmt. Im thermodynamischen Limes wird die Summe in ein Integral überführt, das sich ins Unendliche erstreckt. Der erhaltene Ausdruck stellt wegen (3.33) in universeller Form die Tieftemperaturkorrektur des gesamten Gleichungssystems (3.44) dar. Auf ihn soll sich nun konzentriert werden. Es folgt dann  $m_{3\mathbf{q}}/\omega_{3\mathbf{q}} \approx 2\chi\omega_{3\mathbf{q}}$  mit

$$\begin{aligned} \omega_{3\mathbf{q}} &\approx \sqrt{a(q_x^2 + q_y^2) + bq_z^2}, \\ a &= \frac{J_{\parallel}}{2} (J_{\parallel}(1 - 2\eta_{\parallel}(4c_{1,0,0} - c_{1,1,0} - c_{2,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{\parallel}c_{1,0,0})), \\ b &= \frac{J_{\perp}}{2} (J_{\perp}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 8J_{\parallel}\eta_{\perp}(c_{1,0,1} - c_{0,0,1})), \end{aligned}$$

wobei  $\chi$  die uniforme statische Suszeptibilität ist. Übrigens besteht wegen (3.34) zwischen  $a$  und  $b$  der Zusammenhang:  $J_{\perp}c_{0,0,1}a = J_{\parallel}c_{1,0,0}b$ . In endgültiger Form lautet das zu lösende Integral

$$\frac{2\chi}{3V_{BRZ}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{a(q_x^2 + q_y^2) + bq_z^2}}{\exp(\sqrt{a(q_x^2 + q_y^2) + bq_z^2}/kT) - 1} dq_x dq_y dq_z.$$

Alsdann gewinnt man nach Einführung von Zylinderkoordinaten

$$\frac{4\pi\chi}{3V_{BRZ}} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{a\rho^2 + bq_z^2}}{\exp(\sqrt{a\rho^2 + bq_z^2}/kT) - 1} \rho d\rho dq_z,$$

woraus nach nochmaliger Substitution entsprechend

$$\rho = r \sin \varphi / \sqrt{a}, \quad q_z = r \cos \varphi / \sqrt{b}$$

mit  $r \in [0, +\infty]$  und  $\varphi \in [0, \pi]$

$$\frac{8\pi\chi}{3V_{BRZ}a\sqrt{b}} \int_0^{+\infty} \frac{r^3}{\exp(r/kT) - 1} dr$$

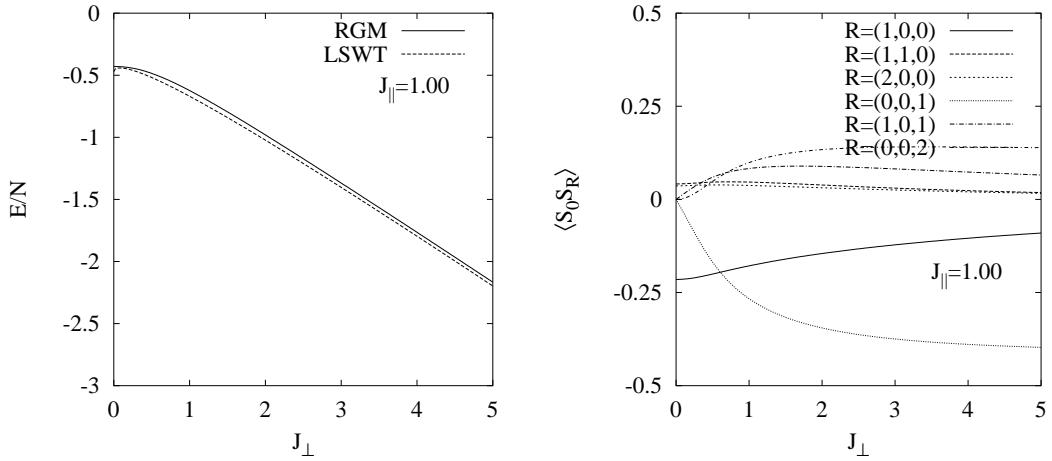


Abbildung 3.14: RGM: Die innere Energie (links) und verschiedene Korrelationsfunktionen (rechts) in Abhängigkeit von  $J_{\perp} > 0$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  im Grundzustand. Zum Vergleich wird die Spinwellenenergie für  $s = 1/2$  präsentiert.

hervorgeht. Daran anschließend erhält man durch  $r = kTx$

$$\frac{8\pi\chi}{3V_{BRZ}a\sqrt{b}}(kT)^4 \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{\exp(x)-1} dx = \frac{2\pi^2\sqrt{3}\chi}{45a\sqrt{b}}(kT)^4. \quad (3.66)$$

Damit ist die gesuchte Korrektur der vierten Potenz der Temperatur proportional. Es darf dann erwartet werden, daß sich diese Proportionalität auch auf die Lösungen des Gleichungssystems selbst überträgt, so daß die innere Energie ebenfalls mit  $T^4$  geht und demzufolge die spezifische Wärme die korrekte  $T^3$ -Abhängigkeit aufweist, die für dreidimensionale Antiferromagnete typisch ist; die LSWT konnte dies nicht leisten, obwohl die Übereinstimmung der Grundzustandsenergien verblüffend ist. Im übrigen gilt diese Ableitung für alle in Frage kommenden  $J_{\parallel}, J_{\perp}$ , insbesondere also auch in den Grenzen beliebig kleiner oder großer Kopplungen. In der spezifischen Wärme spiegelt sich der Übergang von einem zwei- zu einem drei- hin zu einem eindimensionalen Spinsystem nicht wider. Die Gestalt der Dispersionsrelationen bestimmt einzig und allein die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme.

Man könnte glauben, daß einfaches Einsetzen der Grundzustandslösungen in (3.66) die korrekten Vorfaktoren für die Tieftemperaturkorrekturen der Korrelatoren ergeben würde. Diese Annahme ist jedoch falsch. Vielmehr muß das gesamte Gleichungssystem mit Korrektur auch jetzt wieder selbstkonsistent gelöst werden. Zwei simple Beispiele für ein System nichtlinearer Gleichungen im Anhang C illustrieren die Notwendigkeit der sorgfältigen Untersuchung der Frage, welche Form der Näherung für die Vorfaktoren die richtige ist.

Bei der Auswertung des Gleichungssystems treten jedoch prinzipielle Schwierigkeiten auf - die spezifische Wärme ist für kleine Temperaturen negativ. Unmittelbare Ursache für die negative spezifische Wärme ist die Tatsache, daß  $c_{0,0,1}$  für hinreichend kleine Temperaturen zunächst betragsmäßig zunimmt<sup>46</sup>. Weitere Inkonsistenzen ergeben sich bei höheren Temperaturen. So findet man z.B. für  $J_{\parallel} = J_{\perp} = 1.00$  und  $kT \approx 2.00$

<sup>46</sup>An sich ist die betragsmäßige Zunahme von Korrelationen mit der Temperatur allein kein

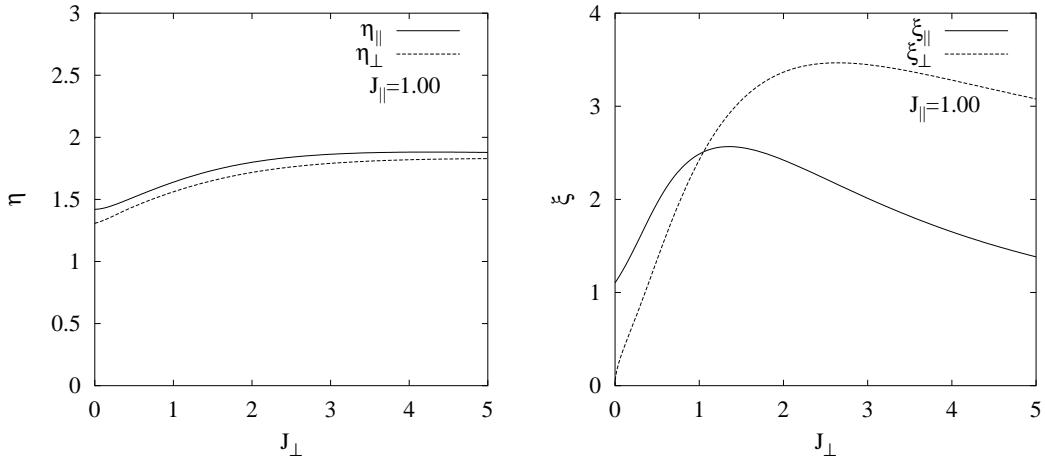


Abbildung 3.15: RGM: Die Vertexparameter (links) und die Korrelationslängen (rechts) als Funktionen von  $J_{\perp} > 0$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  im Grundzustand.

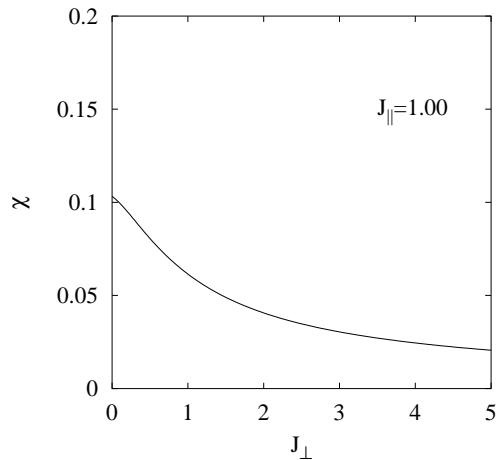


Abbildung 3.16: RGM: Die uniforme statische Suszeptibilität  $\chi$  gemäß (3.35) über  $J_{\perp} > 0$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  im Grundzustand.

gar keine physikalisch vernünftige Lösung, obwohl der Hochtemperatur- als auch der Tieftemperaturlimes korrekt herauskommen. Exemplarisch ist diese Situation anhand der Vertexparameter in Abb. 3.17 dargestellt. Auch die Eindeutigkeit der Lösungen ist in gewissen Parameterbereichen nicht gesichert. Im Grenzfall  $J_{\perp} = 0$ , dem HAFM auf dem puren Kagomé-Gitter, treten diese Besonderheiten nicht in Erscheinung. Die spezifische Wärme ist auch für kleine Temperaturen dann positiv und besitzt die richtige Proportionalität zu  $T^2$  [28]. Außerdem lassen sich im gesamten Temperaturbereich eindeutige, physikalisch vernünftige Lösungen ohne Unstetigkeiten auffinden.

Vermutlich sind zwei Vertexparameter - anders als im Falle des reinen Ferromagneten - einfach zu wenig, um die komplexen Eigenschaften des geschichteten Kagomé-Gitters

---

grundlegendes Problem, da man derartiges Verhalten auch von Spinsystemen [90] kennt, in denen *order-from-disorder* auftritt.

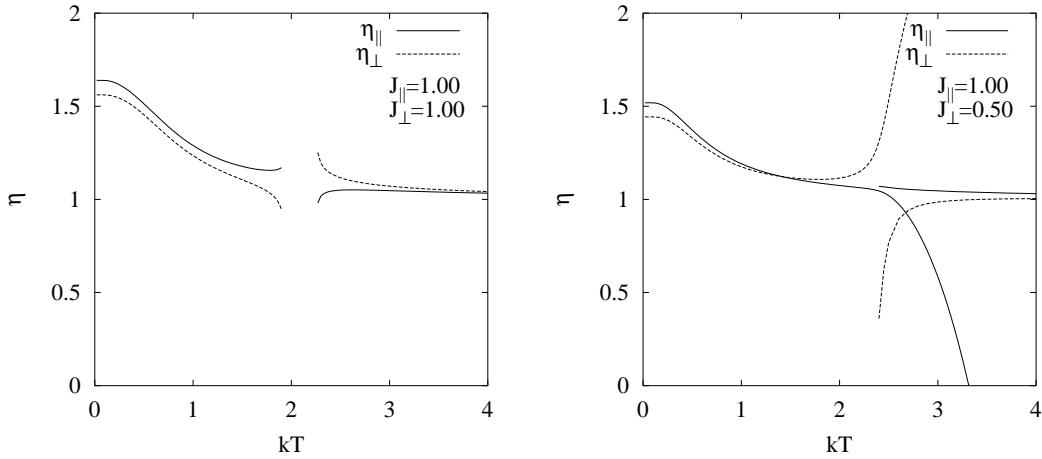


Abbildung 3.17: RGM: Die Vertexparameter für  $J_{\perp} = 1.00$  (links) und  $J_{\perp} = 0.50$  (rechts) als Funktionen der Temperatur  $kT$ . Es existieren Bereiche, wo es entweder gar keine Lösung gibt oder aber gleichzeitig mehrere zu finden sind. Die entsprechenden Zweige erhält man, wenn man beim Iterieren vom Grundzustand oder vom Hochtemperaturlimes ausgeht.

mit ausschließlich antiferromagnetischen Bindungen im gesamten Parameterraum beschreiben zu können. Das pauschale Gleichsetzen von Vertexparametern ist offenkundig eine viel zu grobe Approximation, denn es ist genaugenommen überhaupt nicht einzusehen, weshalb Operatorprodukte, die parallelen Spins zuzuordnen sind, in derselben Weise entkoppelt werden wie Operatorprodukte, die zu verkanteten oder antiparallelen Spelpaaren gehören. In einfachen Fällen (Kette, Quadrat, Kagomé) mag das funktionieren. Es gibt aber auch Beispiele in der Literatur [84], wo ein zu großzügiger Umgang mit den Vertexparametern ähnliche Probleme verursacht, welche erst dadurch beseitigt werden, wenn zusätzlicher Input von außen Berücksichtigung findet. Trotzdem ändert sich hier nichts an der prinzipiellen Erkenntnis hinsichtlich der Nichtexistenz von magnetischer Fernordnung für  $J_{\parallel}, J_{\perp} > 0$ .

**Fazit:** LSWT (qualitativ) und RGM (quantitativ) liefern übereinstimmend, daß es sowohl im Grundzustand als auch bei endlichen Temperaturen keine langreichweite Ordnung gibt. Da  $J_{\perp} > 0$  nicht zusätzlich frustriert, wird die unendliche Entartung des klassischen Grundzustandes nicht aufgehoben. Die Entartung ist eine Folge der Frustration, die im zweidimensionalen Fall höchstwahrscheinlich für Unordnung sorgt. An dieser Situation ändert sich im Prinzip nichts, wenn man  $J_{\perp}$  "einschaltet". In einer verbesserten Theorie sollten mehr als nur zwei Vertexparameter unterschieden werden.

### 3.3.4 Der Fall $J_{\parallel} > 0, J_{\perp} < 0$

Bezüglich des klassischen Grundzustandes gelten dieselben Aussagen wie für den Fall  $J_{\parallel} > 0$  und  $J_{\perp} > 0$ .

**Lineare Spinwellentheorie für  $J_{\parallel} > 0$  und  $J_{\perp} < 0$ :** Als bosonischen Hamilton-

Operator findet man unter Verwendung von (2.9)

$$\begin{aligned}
H &= -J_{||}Ns^2 + J_{\perp}Ns^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\
H_{\mathbf{q}} &= (2J_{||}s - 2J_{\perp}s(1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_3))) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}}) \\
&- \frac{3J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2-\mathbf{q}}^+ + a_{1\mathbf{q}} a_{2-\mathbf{q}}) \\
&- \frac{3J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3-\mathbf{q}}^+ + a_{2\mathbf{q}} a_{3-\mathbf{q}}) \\
&- \frac{3J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ + a_{3\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}) \\
&+ \frac{J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) (a_{1\mathbf{q}}^+ a_{2\mathbf{q}} + a_{1\mathbf{q}} a_{2\mathbf{q}}^+) \\
&+ \frac{J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_2) (a_{2\mathbf{q}}^+ a_{3\mathbf{q}} + a_{2\mathbf{q}} a_{3\mathbf{q}}^+) \\
&+ \frac{J_{||}s}{2} \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_1) (a_{3\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} + a_{3\mathbf{q}} a_{1\mathbf{q}}^+). \tag{3.67}
\end{aligned}$$

Die Dispersionsrelationen haben wiederum eine analytische Form:

$$\begin{aligned}
\omega_{1\mathbf{q}} &= s\sqrt{4J_{\perp}^2(1 - \cos q_z)^2 - 6J_{||}J_{\perp}(1 - \cos q_z)}, \\
\omega_{2\mathbf{q}} &= s\sqrt{a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}}, \quad \omega_{3\mathbf{q}} = s\sqrt{a_{\mathbf{q}} - b_{\mathbf{q}}} \tag{3.68}
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
a_{\mathbf{q}} &= 4J_{||}^2 \left( 2\cos^2 \frac{q_y}{2} + \left( \cos^2 \frac{\sqrt{3}q_x}{2} + \cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \left( 1 - 2\cos^2 \frac{q_y}{2} \right) \right) \\
&+ 4J_{\perp}^2 (1 - \cos q_z)^2 - 9J_{||}J_{\perp}(1 - \cos q_z), \\
b_{\mathbf{q}} &= J_{||}J_{\perp}(1 - \cos q_z) D_{\mathbf{q}}.
\end{aligned}$$

Für  $q_z = 0$  wird  $\omega_{1\mathbf{q}}$  zu einer flachen Nullmode sowie  $\omega_{2\mathbf{q}}$  und  $\omega_{3\mathbf{q}}$  entarten. Darin manifestiert sich die Nichtexistenz magnetischer Fernordnung. Alle durch (3.68) gegebenen Moden sind akustischer Natur. In der Umgebung von  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  verhalten sie sich gemäß

$$\begin{aligned}
\omega_{1\mathbf{q}} &\approx s\sqrt{-3J_{||}J_{\perp}} |q_z|, \\
\omega_{2\mathbf{q}} &\approx s\sqrt{3J_{||}^2(q_x^2 + q_y^2) - 3J_{||}J_{\perp}q_z^2}, \\
\omega_{3\mathbf{q}} &\approx s\sqrt{3J_{||}^2(q_x^2 + q_y^2) - 6J_{||}J_{\perp}q_z^2}.
\end{aligned}$$

Einsetzen in die Beziehung für die innere Energie

$$\begin{aligned}
E &= (-J_{||} + J_{\perp}) Ns(s+1) \\
&+ \sum_{\mathbf{q}} \sum_{m=1}^3 \omega_{m\mathbf{q}} \left( \frac{1}{\exp(\omega_{m\mathbf{q}}/kT) - 1} + \frac{1}{2} \right) \tag{3.69}
\end{aligned}$$

im Grenzfall tiefer Temperaturen ergibt, daß im thermodynamischen Limes der führende Term in der Entwicklung quadratisch mit  $kT$  geht und von  $\omega_{1\mathbf{q}}$  herrührt.  $\omega_{2\mathbf{q}}$  bzw.

$\omega_{3q}$  liefern lediglich Beiträge vierter Ordnung. Konkret gelten

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \frac{N\pi}{18s\sqrt{-3J_{||}J_{\perp}}} (kT)^2, \\ \frac{C}{N} &= \frac{\pi}{9s\sqrt{-3J_{||}J_{\perp}}} kT. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Damit gehorcht die spezifische Wärme im Rahmen der LSWT dem Potenzgesetz eines eindimensionalen Antiferromagneten. Angesichts der prinzipiellen Schwierigkeiten, die die Spinwellentheorie mit ungeordneten Strukturen hat, ist dies ein Ergebnis, das nicht verwunderlich ist.

**Rotationsinvariante Greenfunktionsmethode für  $J_{||} > 0$  und  $J_{\perp} < 0$ :** Bei den gegebenen Parameterverhältnissen besitzt das Gleichnungssystem nur Lösungen ohne Kondensat. Es gelten (3.34) und (3.44). Das ist für endliche Temperaturen ebenso wie für den Grundzustand richtig. Allerdings treten auch hier Schwierigkeiten auf. Es sind dies aber keine prinzipiellen, sondern eher numerische Probleme, die sogar eine physikalische Interpretation erlauben. Dazu sei der Grundzustand betrachtet, wobei  $|J_{\perp}|$  mit Null beginnend systematisch vergrößert wird. Es ist dann folgendes zu beobachten: Bekanntlich ist  $\omega_{1q}$  eine Mode, die nur von  $q_z$  abhängt und deshalb bei festem  $q_z$  eine flache, dispersionslose Mode beschreibt. Für  $q_z = 0$  bildet diese flache Mode eine Lücke  $\Delta = \lim_{q_z \rightarrow 0} \omega_{1q}$ , die durch

$$\Delta = \sqrt{3J_{||}(J_{||}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0})) + 4J_{\perp}(\eta_{\perp}c_{1,0,1} - \eta_{||}c_{1,0,0}))}$$

gegeben ist. Nimmt  $|J_{\perp}|$  zu, so schließt sich diese Lücke, d.h.  $\Delta$  geht gegen Null und gehorcht dabei einem Exponentialgesetz<sup>47</sup>. So findet man z.B. für  $J_{||} = 1.00$  die Beziehung  $\Delta = 1.0134 \exp(1.4228J_{\perp})$  nach Abb. 3.19. Tendenziell wird  $\omega_{1q}$  also zu einer flachen Nullmode für  $q_z = 0$ . Gleichzeitig, und das in einem viel stärkeren Maße, strebt die Differenz  $\omega_{2q} - \omega_{3q}$  für  $q_z = 0$  gegen Null. Die Moden  $\omega_{2q}$  und  $\omega_{3q}$  sind demnach für hinreichend große  $|J_{\perp}|$  und  $q_z = 0$  quasientartet; in Abb. 3.20 ist diese Situation dargestellt. Deshalb ergeben sich wegen (3.12) beim Aufstellen der Gleichungen quasidivergente Integranden für alle  $\mathbf{q}$  in der  $q_z = 0$ -Ebene, die die weitere numerische Auswertung unmöglich erscheinen lassen. Ein solches Verhalten lässt sich vielleicht dadurch erklären, daß die ferromagnetische Kettenkopplung  $J_{\perp}$  zur Ausbildung makroskopischer, d.h. quasiklassischer Spins, entlang der Ketten führt. Diese Kettenspins wiederum koppeln Kagomé-artig miteinander. Im Ergebnis erhält man sozusagen ein Spinsystem, das dem HAFM auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter ähnelt, dessen Plätze mit klassischen Spins besetzt sind. Bezuglich des Spektrums deckt sich dieses Bild mit der LSWT, jedoch mit dem Unterschied, daß die Nullmode sowie die Entartung der übrigen Moden für beliebiges  $J_{\perp}$  in Erscheinung tritt. Überraschend ist nur, daß die Formierung quasiklassischer Kettenspins mit  $|J_{\perp}| \approx J_{||}$  relativ früh einsetzt. Freilich öffnet sich die Lücke nach Abb. 3.19 wieder, wenn die Temperatur steigt. Mit dem Schließen bzw. Öffnen der Lücke ist die Zunahme bzw. Abnahme der Korrelationslängen zumindest in dem numerisch zugänglichen Parameterbereich verbunden,

---

<sup>47</sup>Dies ist ein Ergebnis, das sich durch Interpolation verifizieren lässt. Man findet ein exponentielles Schließen einer Lücke im Spektrum mit abnehmender Temperatur auch beim Quadratgitter [80].

was durch Abb. 3.21 illustriert wird. Der Eigenwert  $G_{2\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  liefert für  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  das absolute Minimum aller Eigenwerte. Aus der Entwicklung folgt somit

$$\xi_{||}^2 = \frac{-6J_{||}^2\eta_{||}c_{1,0,0}}{\Delta^2}, \quad \xi_{\perp}^2 = \frac{J_{\perp}a}{2c_{1,0,0}\Delta^2} \quad (3.71)$$

und

$$\begin{aligned} a &= J_{\perp}(c_{1,0,0}(1 - 2\eta_{\perp}(3c_{0,0,1} - c_{0,0,2})) + 4c_{0,0,1}(\eta_{||}c_{1,0,0} - \eta_{\perp}c_{1,0,1})) \\ &+ J_{||}(4c_{1,0,0}(3\eta_{||}c_{1,0,0} + 2\eta_{\perp}c_{1,0,1} + \eta_{\perp}c_{0,0,1}) \\ &- c_{0,0,1}(1 + 2\eta_{||}(2c_{1,0,0} + c_{1,1,0} + c_{2,0,0}))) . \end{aligned}$$

In Abb. 3.22 sind die Vertexparameter und in Abb. 3.23 ist die uniforme statische Suszeptibilität in Abhängigkeit von  $J_{\perp}$  bzw.  $kT$  dargestellt. Während es bei den Vertexparametern keine Auffälligkeiten gibt - für große  $kT$  gehen sie erwartungsgemäß gegen Eins - , fällt die leichte Zunahme von  $\chi$  mit wachsendem  $|J_{\perp}|$  für  $kT = 0.00$  ins Auge. Als problematisch erweisen sich auch in diesem Fall die Korrelationsfunktionen in Abb. 3.24 und die innere Energie in Abb. 3.25 insbesondere im Tieftemperaturregime. Zu beobachten ist z.B. das kaum merkliche betragsmäßige Anwachsen der Korrelatoren  $c_{0,0,1}$  für kleine Temperaturen mit der Folge, daß die innere Energie in dem entsprechenden Temperaturintervall abnimmt und die spezifische Wärme nach Abb. 3.26 negativ wird. Das dafür verantwortliche Verhalten der Lösungen ist vermutlich auf die einfache Entkopplung zurückzuführen. Im übrigen wird das Gleichungssystem durch (3.66) genauso wie im Fall  $J_{||}, J_{\perp} > 0$  tieftemperaturkorrigiert.

**Fazit:** Auch hier liefern LSWT (qualitativ) und RGM (quantitativ) übereinstimmend, daß magnetische Fernordnung trotz eines ferromagnetischen  $J_{\perp}$  nicht zustande kommt. Beschränkt man sich auf den Grundzustand, so führt das "Aufdrehen" von  $|J_{\perp}|$  im Rahmen der RGM dazu, daß in der  $q_z = 0$ -Ebene die Mode  $\omega_{1\mathbf{q}}$  zu einer flachen Nullmode wird sowie  $\omega_{2\mathbf{q}}$  und  $\omega_{3\mathbf{q}}$  entarten. Dies geschieht ebenfalls in der LSWT für beliebig kleine  $|J_{\perp}|$ . Qualitativ läßt sich das dahingehend deuten, daß die Spins entlang der Ketten makroskopische Spins bilden, die Kagomé-artig wechselwirken. Das Spektrum entspricht dann effektiv dem eines klassischen Spinsystems auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter. Wegen der Quasientartung der Dispersionen und der damit verbundenen numerischen Probleme ist jedoch dieser Parameterbereich nicht mehr zugänglich. Für kleine  $kT$  - also in einem Bereich, wo Quanteneffekte noch eine Rolle spielen - wird die spezifischen Wärme leicht negativ. Vermutlich lassen sich diese Mängel der Theorie durch die Einführung mehrerer Vertexparameter beseitigen.

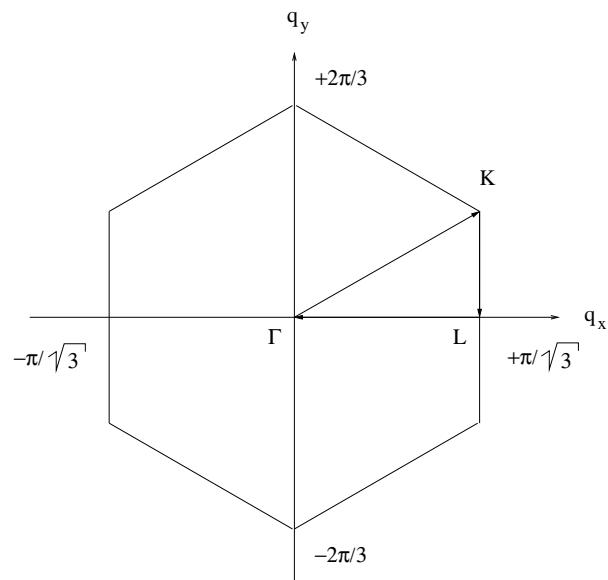


Abbildung 3.18: Die  $q_z = 0$ -Ebene der Brillouin-Zone. Entlang der Pfeile erfolgt die Darstellung des Spektrums in Abb.3.20.

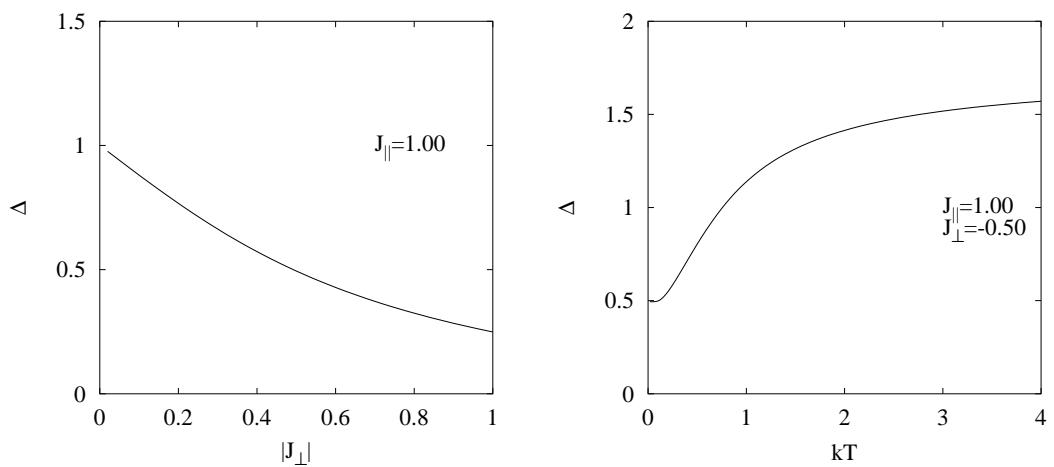


Abbildung 3.19: RGM: Die Lücke  $\Delta$  als Funktion von  $J_{\perp}$  für  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  (links) sowie als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

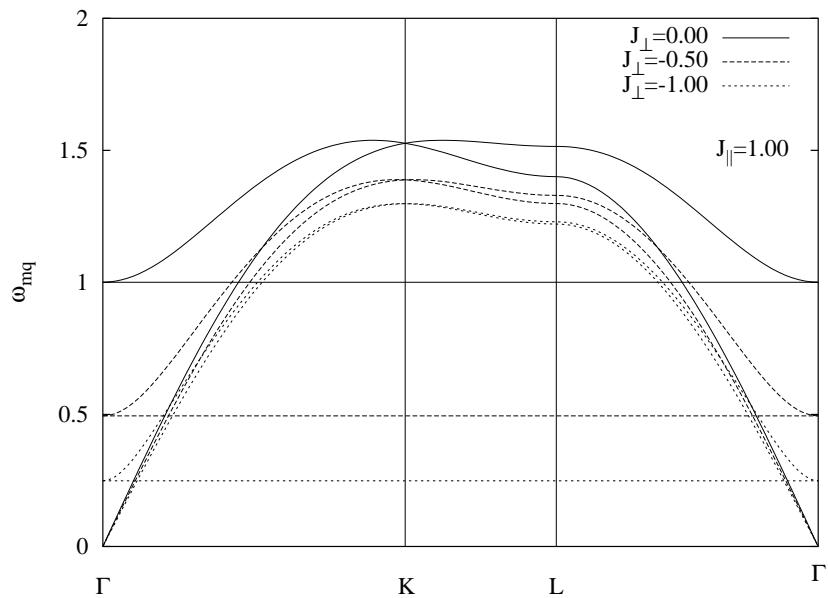


Abbildung 3.20: RGM: Das Grundzustandsspektrum in Abhangigkeit von  $J_{\perp}$ .

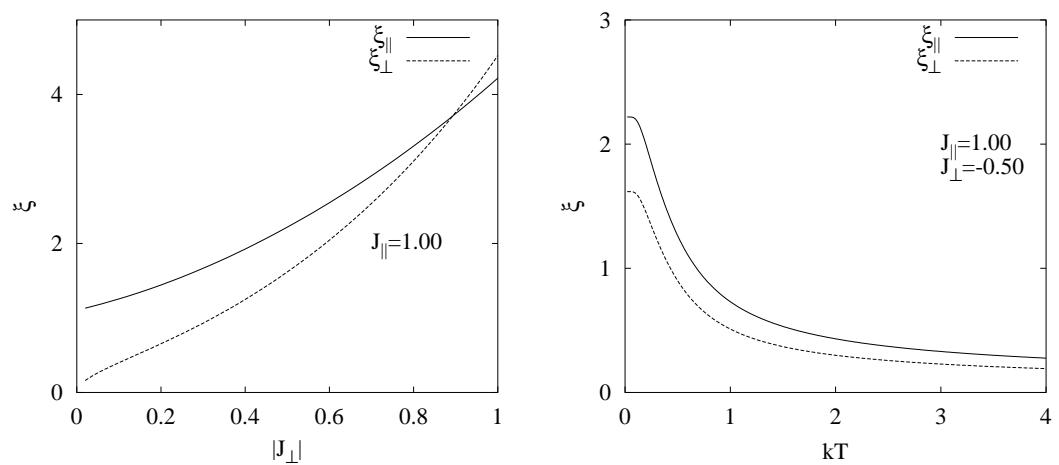


Abbildung 3.21: RGM: Die Korrelationslangen als Funktionen von  $J_{\perp}$  fur  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  (links) sowie als Funktionen der Temperatur  $kT$  fur  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

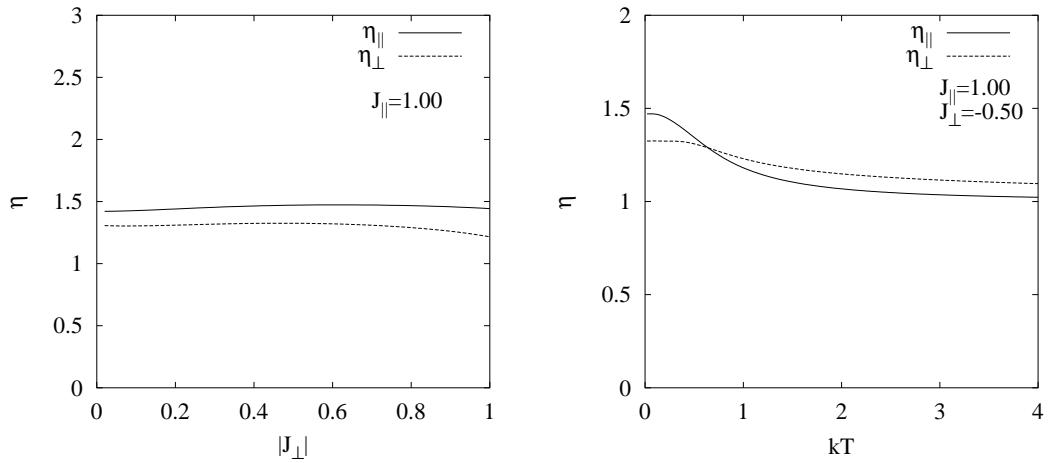


Abbildung 3.22: RGM: Die Vertexparameter als Funktionen von  $J_{\perp}$  für  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  (links) sowie als Funktionen der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

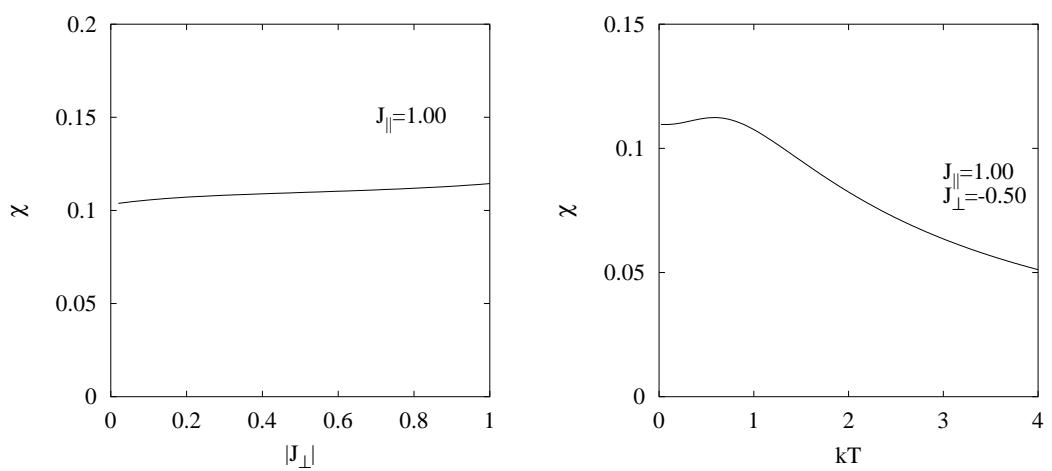


Abbildung 3.23: RGM: Die uniforme statische Suszeptibilität als Funktion von  $J_{\perp}$  für  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  (links) sowie als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

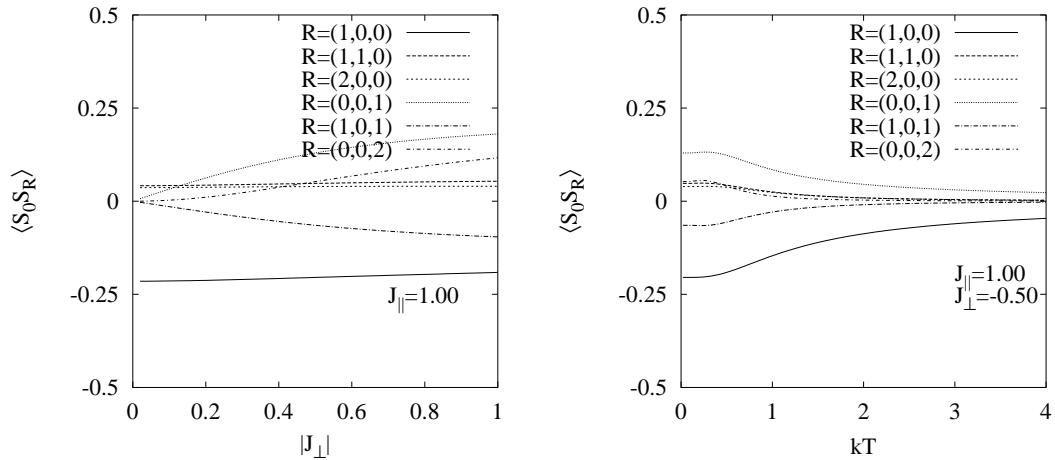


Abbildung 3.24: RGM: Einige Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von  $J_{\perp}$  für  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  (links) sowie in Abhängigkeit von der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

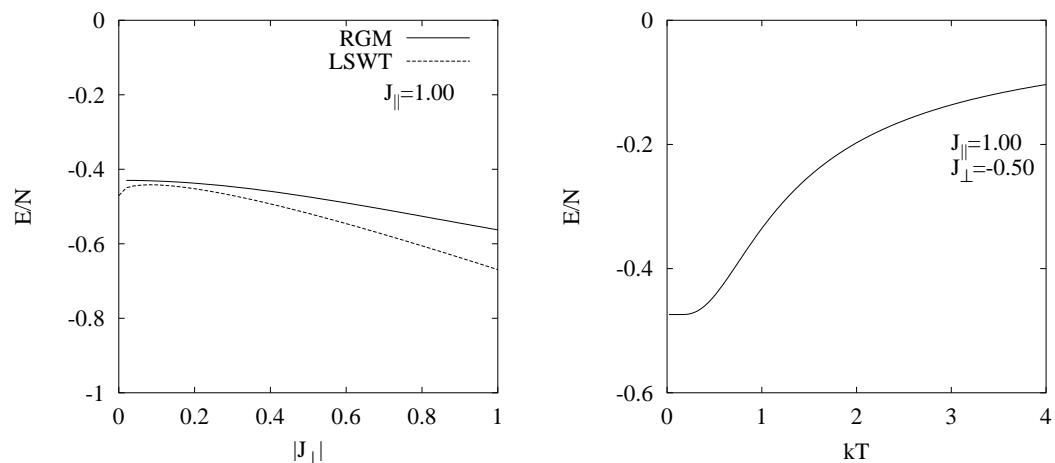


Abbildung 3.25: RGM: Die innere Energie als Funktion von  $J_{\perp}$  für  $kT = 0.00$  und  $J_{\parallel} = 1.00$  verglichen mit dem Spinwellenresultat (links) und als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$  (rechts).

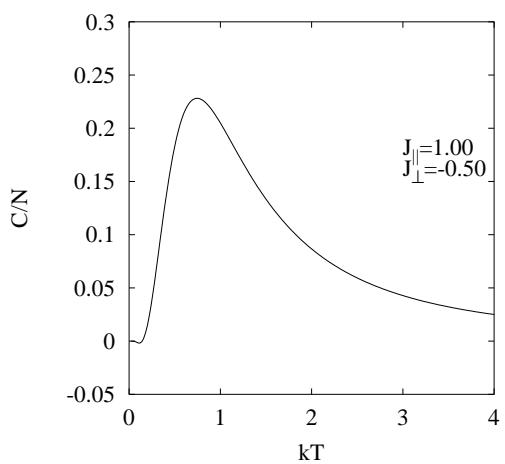


Abbildung 3.26: RGM: Die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur  $kT$  für  $J_{\parallel} = 1.00$  und  $J_{\perp} = -0.50$ .

# Kapitel 4

## Zusammenfassung

Anliegen dieser Arbeit war die detaillierte Darstellung zweier zur Behandlung des Heisenberg-Modells geeigneter Methoden und deren Anwendung auf verschiedene, durch dieses Modell beschriebene Quantenspinsysteme. Beide Methoden - sowohl die lineare Spinwellentheorie als auch die rotationsinvariante Greenfunktionsmethode - sind vorrangig analytische Verfahren. Aus physikalischer Sicht galt das Hauptaugenmerk vor allem der Beantwortung der Frage, ob magnetische Fernordnung in den betreffenden Spinsystemen existiert bzw. zu welchen Schlüssen beide Methoden unabhängig voneinander kommen. Zu den Faktoren, deren jeweiliger Einfluß über Ordnung oder Unordnung entscheidet, gehören die Frustration, die Intensität und Stärke der Quantenfluktuationen, die Dimensionalität des Gitters, die Koordinationszahl der wechselwirkenden Spins sowie die Temperatur als äußerer Parameter. Die betrachteten Spinsysteme enthielten alle mehr als einen Spin pro relevanter Elementarzelle; entsprechend höher war der zu betreibende formale Aufwand.

In Kapitel 2 ging es zunächst um vier allgemeine Verfahren zur Diagonalisierung bosonischer Hamilton-Operatoren, wie sie typischerweise in der linearen Spinwellentheorie auftreten. Dabei erwies sich eine Greenfunktionstechnik als die praktikabelste, weil sie auf das Lösen komplizierter nichtlinearer Gleichungen zur Bestimmung der Bogoliubov-Koeffizienten verzichtet. Alsdann wurde das *A-B*-Modell mit seinen charakteristischen, einander durchdringenden Spinsystemen untersucht. Es besitzt wegen einer frustrierten Kopplung  $J_{AB}$  ein reichhaltiges klassisches Grundzustandsphasendiagramm. Ein interessantes Phänomen ergibt sich im Grenzfall schwacher Frustration. Klassisch liegen dann zwei magnetisch entkoppelte Spinsysteme vor. Jedes Spinsystem ist im Grundzustand für sich Néel-geordnet. Bezüglich der relativen Orientierung zueinander ist der klassische Grundzustand kontinuierlich entartet; die klassische Grundzustandsenergie hängt nicht von  $J_{AB}$  ab. Wie die lineare Spinwellentheorie zeigen konnte, wird diese Entartung durch Quantenfluktuationen aufgehoben. Letztere stabilisieren kolineare Ordnung, die einer relativen Orientierung von  $\varphi = 0, \pi$  entspricht. Somit wird die quantenkorrigierte Grundzustandsenergie  $J_{AB}$ -abhängig. Insbesondere bedeutet dies, daß Spins aus verschiedenen Untersystemen im Quantenfall miteinander korreliert sind. Das *A-B*-Modell ist bei relativ schwacher Frustration im Grundzustand magnetisch ferngeordnet. Der Effekt ist deshalb so interessant, weil die Ordnung durch Quantenfluktuationen realisiert wird. Im Anschluß daran stand der HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter im Mittelpunkt der Betrachtungen. Jeder Spin im Maple-Leaf-Gitter koppelt mit

fünf Nachbarspins. Liegt eine antiferromagnetische Kopplung vor, so ist das Spinsystem geometrisch frustriert. Eine verwandte Gitterstruktur weisen das Dreiecks- und das Kagomé-Gitter auf, weshalb auch hier geometrische Frustration auftritt, wenn nächstbenachbarte Spins antiferromagnetisch koppeln. Im Unterschied zum Maple-Leaf-Gitter besitzt jedoch jeder Spin im Dreiecksgitter sechs nächste Nachbarn und jeder Spin im Kagomé-Gitter vier nächste Nachbarn. Wesentliches Element des klassischen Grundzustandes in allen drei Fällen ist die  $120^\circ$ -Struktur, entsprechend der sich die Spins orientieren. Zusätzlich ist der klassische Grundzustand des Kagomé-Gitters hochgradig entartet. Vom Dreiecksgitter ist bekannt, daß es trotz Quantenfluktuationen quasiklassische Fernordnung besitzt. Andererseits gilt der Grundzustand des HAFM auf dem Kagomé-Gitter als quantenungeordnet. In allen drei Gittern steuert die Koordinationszahl  $z$  den Einfluß der Quantenfluktuationen auf das frustrierte Spinsystem. Wenn also das Dreiecksgitter mit  $z = 6$  quasiklassisch und das Kagomé-Gitter mit  $z = 4$  gar nicht geordnet ist, dann ist die Frage nach dem Grad der Ordnung im Maple-Leaf-Gitter mit  $z = 5$  nur natürlich. Die lineare Spinwellentheorie kam dabei zu dem Ergebnis, daß der HAFM auf dem Maple-Leaf-Gitter über einen ähnlich geordneten Grundzustand wie auf dem Dreiecks-Gitter verfügt. Allerdings ist der Ordnungsparameter vermöge der geringeren Koordinationszahl gegenüber dem Dreiecks-Gitter stärker reduziert.

Kapitel 3 beschäftigte sich umfassend mit der rotationsinvarianten Greenfunktionsmethode für  $s = 1/2$ . Neben der ausführlichen Herleitung der wichtigen mathematischen Zusammenhänge und deren Illustration am Beispiel der linearen Kette, konzentrierte sich dieses Kapitel vor allem auf das geschichtete Kagomé-Gitter. Ausgangspunkt der Überlegungen war der HAFM auf dem zweidimensionalen Kagomé-Gitter mit seinem Grundzustand, der höchstwahrscheinlich keine magnetische Fernordnung besitzt, wofür es zwar keinen exakten Beweis gibt, trotzdem aber genügend Hinweise und Indizien existieren. Von der Vorstellung ausgehend, daß dreidimensionale Spinsysteme eher zu magnetischer Ordnung neigen als zweidimensionale, weil die zusätzliche Dimension ordnungsreduzierende Fluktuationen jeglicher Art zumeist unterdrückt, wurde ein Spinsystem auf einem dreidimensionalen Kagomé-Gitter betrachtet; außer der üblichen Kopplung  $J_{||}$  zwischen nächstbenachbarten Spins innerhalb der Kagomé-Ebenen gibt es eine zusätzliche Zwischenebenenkopplung  $J_{\perp}$ , vermittels der nächstbenachbarte Spins angrenzender Ebenen wechselwirken. Gegenstand der Untersuchungen war die Frage, ob und unter welchen Umständen in einem solchen Spinsystem wegen  $J_{\perp} \neq 0$  insbesondere für  $J_{||} > 0$  magnetische Ordnung möglich wird. Aus den Rechnungen im Rahmen der rotationsinvarianten Greenfunktionsmethode ergab sich aber für den Fall eines antiferromagnetischen  $J_{||}$ , daß unabhängig von Größe und Vorzeichen der Zwischenebenenkopplung  $J_{\perp}$  magnetische Ordnung auch im dreidimensionalen Kagomé-Gitter nicht vorliegt. Dies ist eine Aussage, die durch die lineare Spinwellentheorie qualitativ bestätigt wurde. Weil  $J_{\perp}$  nicht zusätzlich frustriert, ist der klassische Grundzustand für  $J_{||} > 0$  und  $J_{\perp} \neq 0$  genauso hochgradig entartet wie im Falle des zweidimensionalen HAFM auf dem puren Kagomé-Gitter. Magnetische Ordnung findet man nur dann, wenn  $J_{||} < 0$  gilt. Es zeigte sich, daß die rotationsinvariante Greenfunktionsmethode zumindest prinzipiell in der Lage ist, die magnetischen Eigenschaften eines Quantensystems auch bei endlichen Temperaturen konsistent zu beschreiben, während die lineare Spinwellentheorie entsprechend ihrer Grundannahmen bestenfalls bei tiefsten Temperaturen verlässliche Resultate liefert, und das auch nur dann, wenn der Grundzustand quasiklassisch geordnet ist. Es soll aber nicht verschwiegen werden, daß die

rotationsinvariante Greenfunktionsmethode auch ihre Tücken hat; in gewissen Parameterregionen waren z.B. keine selbstkonsistenten Lösungen zu finden. In der Willkür beim Umgang mit den Vertexparametern ist eine wahrscheinliche Ursache für das Auftreten dieser und ähnlicher Unzulänglichkeiten in der Theorie zu sehen. So konnten nur zwei Vertexparameter unterschieden werden, da sich ohne zusätzliche Informationen von außen nur genau zwei unabhängige Gleichungen zu ihrer Bestimmung formulieren ließen. Weiterer Input scheint also unbedingt notwendig zu sein, will man zu schlüssigen Resultaten im gesamten Parameterraum gelangen.

# Anhang A

## Allgemeine Bemerkungen zur RGM

### A.1 Relationen zwischen verschiedenen Kondensattermen

Will man magnetische Ordnung in einem Gitter mit Basis beschreiben, so sind verschiedene Kondensatterme zu unterscheiden, da jede Greensche Funktion ihren eigenen besitzt. Zwischen den Kondensattermen bestehen Relationen, die im selbstkonsistent zu lösenden Gleichungssystem Berücksichtigung finden müssen, weil es ansonsten weniger Gleichungen als Unbekannte gäbe - im Anschluß geht es um die Formulierung dieser Relationen. Betrachtet wird die Korrelationsfunktion  $\langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle$  unter der Annahme, daß Fernordnung vorliegt, die durch den magnetischen Ordnungsvektor  $\mathbf{Q}$  beschrieben wird. Es tritt demzufolge Modenkondensation bei  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  auf<sup>1</sup>. Dann gilt

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle \exp(-i\mathbf{qr}_{m\alpha,n\beta}) &= \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{qr}_{m\alpha,n\beta}) \\ &+ NC_{\mathbf{Q}\alpha\beta} \exp(-i\mathbf{Qr}_{m\alpha,n\beta}), \end{aligned}$$

woraus für die betrachtete Korrelationsfunktion formal

$$\langle S_{\mathbf{q}\beta}^- S_{\mathbf{q}\alpha}^+ \rangle = \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}\alpha\beta} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} + NC_{\mathbf{Q}\alpha\beta} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{Q}}$$

folgt. Der Einfachheit halber sei weiterhin angenommen, daß aufgrund der Vertauschbarkeit von  $M_{\mathbf{q}}$  mit  $F_{\mathbf{q}}$  eine Zerlegung der Form (3.15) bzw. (3.16) möglich ist:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) &= \sum_j \frac{m_{j\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{j\mathbf{q}}^2} \langle \alpha | j\mathbf{q} \rangle \langle j\mathbf{q} | \beta \rangle, \\ c_{\mathbf{q}\alpha\beta} &= \sum_j \frac{m_{j\mathbf{q}}}{2\omega_{j\mathbf{q}}} (1 + 2n(\omega_{j\mathbf{q}})) \langle \alpha | j\mathbf{q} \rangle \langle j\mathbf{q} | \beta \rangle. \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Es kann auch Modenkondensation bei verschiedenen  $\mathbf{Q}$  gleichzeitig auftreten; in diesem Zusammenhang sei an das  $J_1$ - $J_2$ -Modell erinnert [31]. Die Betrachtungen sind dann auf das Problem - eine Greensche Funktion und Modenkondensation bei verschiedenen  $\mathbf{Q}$  - auszudehnen, wobei sich an der Grundaussage, daß sich die Kondensatterme zueinander verhalten wie die korrespondierenden statischen Suszeptibilitäten, nichts ändert.

Wenn es zu Modenkondensation kommt, dann divergiert einer der Eigenwerte von  $\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  für  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}^2$ . Es sei dies der  $i$ -te Eigenwert. Dieser Beitrag dominiert in einer Umgebung von  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  alle anderen Terme. Insofern verhalten sich in dieser Umgebung die Matrixelemente wie

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega) \approx -\frac{m_{i\mathbf{q}}}{\omega_{i\mathbf{q}}^2} \langle \alpha | i\mathbf{q} \rangle \langle i\mathbf{q} | \beta \rangle$$

und

$$c_{\mathbf{q}\alpha\beta} \approx \frac{m_{i\mathbf{q}}}{2\omega_{i\mathbf{q}}} (1 + 2n(\omega_{i\mathbf{q}})) \langle \alpha | i\mathbf{q} \rangle \langle i\mathbf{q} | \beta \rangle.$$

Man kann jetzt zwei Elemente der Korrelatorenmatrix zueinander ins Verhältnis setzen, so daß in der betrachteten Umgebung von  $\mathbf{Q}$  zunächst

$$\frac{c_{\mathbf{q}\alpha\beta}}{c_{\mathbf{q}\gamma\delta}} \approx \frac{\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{\lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{G_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)}$$

folgt. Mit  $G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = -\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  ergibt sich daraus im Limes  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$

$$\frac{C_{\mathbf{Q}\alpha\beta}}{C_{\mathbf{Q}\gamma\delta}} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{G_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{G_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\chi_{\mathbf{q}\alpha\beta}^{+-}(\omega)}{\chi_{\mathbf{q}\gamma\delta}^{+-}(\omega)}. \quad (\text{A.1})$$

Auf diese Weise ist folgende Aussage bewiesen: Zwei Kondensatterme verhalten sich zueinander wie die korrespondierenden statischen Suszeptibilitäten im Limes  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ . Wendet man z.B. die RGM auf das Quadratgitter mit Nächster-Nachbar-Kopplung  $J$  an, wobei jede Elementarzelle zwei Spins enthalten soll, so gelten:  $C_{11}/C_{12} = 1$  für  $J < 0$  und  $C_{11}/C_{12} = -1$  für  $J > 0$ . Anzumerken ist, daß es in beiden Fällen zu Modenkondensation bei  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  kommt.

Um Fehler beim Aufstellen und Entkoppeln der Bewegungsgleichungen auszuschließen, kann beispielsweise geprüft werden, wie viele unabhängige Relationen sich formulieren lassen und ob deren Zahl mit der Zahl der "fehlenden" Gleichungen übereinstimmt.

## A.2 Vertexparameter und ihre Rolle bei der Optimierung der RGM-Resultate

Das Beispiel des einfachen HAFM auf dem Quadratgitter soll illustrieren, daß zusätzliche Informationen von außen nicht unabhängig voneinander zur Verbesserung der Resultate herangezogen werden können. Es sei dazu der Grundzustand betrachtet. Mit der möglichen Beschränkung auf das geometrische Gitter tritt Modenkondensation bei  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  auf. Ohne auf die Details der Rechnung näher eingehen zu wollen, lautet die dahingehend zu untersuchende Greensche Funktion

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{m_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2} \quad (\text{A.2})$$

---

<sup>2</sup>Für die lineare Kette konnte in Abschnitt 3.2.5 beobachtet werden, daß gerade  $G_{1\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  die Kondensatbedingung für  $J < 0$  liefert. Im übrigen funktioniert der Beweis auch dann, falls  $[F_{\mathbf{q}}, M_{\mathbf{q}}]_- \neq 0$  gelten sollte.

mit

$$\begin{aligned} m_{\mathbf{q}} &= -8Jc_{1,0}(1 - \gamma_{\mathbf{q}}) \\ \omega_{\mathbf{q}}^2 &= 2J^2(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 + 6\eta_1c_{1,0} + 4\eta_2c_{1,1} + 2\eta_3c_{2,0} - 8\eta_1c_{1,0}(1 + \gamma_{\mathbf{q}})), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

wobei  $J > 0$  und  $\gamma_{\mathbf{q}} = (\cos q_x + \cos q_y)/2$  gelten [81]. Beim Entkoppeln gehen drei verschiedene Korrelatoren  $c_{1,0}, c_{1,1}$  und  $c_{2,0}$  in die Bewegungsgleichung ein. Die entsprechende Indizierung ergibt sich aus  $c_{m,n} = c(m\mathbf{r}_1 + n\mathbf{r}_2)$  unter Verwendung der Gitterbasis  $\mathbf{r}_1 = (1, 0), \mathbf{r}_2 = (0, 1)$ . Jeder dieser Korrelatoren ist zunächst mit einem eigenen Vertexparameter zu versehen. Unter Berücksichtigung der Kondensatbedingung

$$1 + 6\eta_1c_{1,0} + 4\eta_2c_{1,1} + 2\eta_3c_{2,0} = 0$$

ist das Gleichungssystem bei  $N$  Spins/Zellen

$$\begin{aligned} c_{1,0} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1) - C, \quad c_{1,1} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) + C, \\ c_{2,0} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{q}2\mathbf{r}_1) + C, \quad \frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}} + C \end{aligned}$$

mit

$$c_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{-c_{1,0}}{\eta_1}} \sqrt{\frac{1 - \gamma_{\mathbf{q}}}{1 + \gamma_{\mathbf{q}}}}$$

zu lösen. Hervorzuheben ist, daß  $c_{\mathbf{q}}$  obige Gestalt unabhängig davon hat, wieviele Vertexparameter unterschieden werden. Dafür verantwortlich ist die Kondensatbedingung. Der Kondensatterm  $C$  steht bekanntlich mit der Magnetisierung  $M$  über  $M^2 = 3C/2$  in Verbindung. Insgesamt gibt es sieben selbstkonsistent zu bestimmende Parameter, für die aber nur fünf Gleichungen zur Verfügung stehen. Eine zunächst naheliegende Reduktion der Variablenzahl gemäß  $\eta_i = \eta$  für  $i = 1, 2, 3$  führt im thermodynamischen Limes auf  $c_{1,0} = -0.20677, c_{1,1} = 0.11615, c_{2,0} = 0.09480$  und  $\eta = 1.70517$ . Daraus folgt die Energie pro Spin zu  $E_0/JN = 3c_{1,0} = -0.62032$ . Mit dem Kondensatterm  $C = 0.01488$  ergibt sich allerdings eine Magnetisierung, die mit  $M = 0.1494$  viel zu gering ausfällt. Magnetische Ordnung wird eben durch eine Theorie, deren Schwerpunkt kurzreichweite Korrelationen bilden, in Anwesenheit starker Quantenfluktuationen nur unzureichend berücksichtigt. Vielmehr gilt eine Magnetisierung, die ungefähr doppelt so groß ist, im Falle des HAFM auf dem Quadratgitter als gesichert. Will man nun eine Verbesserung der Theorie dadurch erreichen, daß man z.B. über  $M$  das Kondensat  $C$  vorgibt, so bilden die Gleichungen für  $c_{1,0}, c_{1,1}$  und  $c_{2,0}$  zusammen mit der Summenregel ein reduziertes, aber in sich geschlossenes Gleichungssystem zur Bestimmung von  $c_{1,0}, c_{1,1}, c_{2,0}$  und  $\eta_1$ , worauf die übrigen Vertexparameter  $\eta_2$  und  $\eta_3$  keinen Einfluß mehr haben. Letztere haben nur für die Erfüllung der Kondensatbedingung zu sorgen. Gleches gilt, wenn man über die Energie den Korrelator  $c_{1,0}$  festlegt. Dann bilden besagte Gleichungen ein geschlossenes System für  $c_{1,1}, c_{2,0}, C$  und  $\eta_1$ . Dabei bewirkt eine realistischere Energie (-0.65795 aus LSWT) eine höhere Magnetisierung (0.2315) bzw. umgekehrt eine realistischere Magnetisierung (0.3034 aus LSWT) eine tiefere Energie (-0.70458). Wenn man aber  $M$  und  $E_0/JN$  zusammen fixiert, weil es

ja drei Vertexparameter gibt, mit deren Hilfe man die Resultate im Prinzip optimieren kann, dann führt dieses Vorgehen zu einem Widerspruch, denn aus  $M$  und  $E_0/JN$  folgen  $C$  respektive  $c_{1,0}$ . Es genügt jetzt die Summenregel, um  $\eta_1$  zu berechnen. Das dadurch gewonnene Ergebnis ist aber nicht mit Gleichung

$$c_{1,0} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}} c_{\mathbf{q}} \exp(-i\mathbf{qr}_1) - C$$

vereinbar. Ein solches Gleichungssystem besitzt keine Lösung. Die Annahme, die Freiheit in Bezug auf alle Vertexparameter voll ausnutzen zu können, um die Theorie in optimaler Weise zu verbessern, kann also auf einen Widerspruch führen.

### A.3 Korrelationslänge

Das Quadratgitter mit einem Spin pro Zelle wird jetzt benutzt, um zu demonstrieren, wie Korrelationslängen innerhalb der RGM definiert sind und welche Prozedur auf die entsprechenden Beziehungen führt. Ziel ist es, dieses Verfahren auf Gitter mit Basis zu erweitern. Ausgangspunkt sind zunächst (A.2) und (A.3). Im Grundzustand ist das Spinsystem sowohl für  $J < 0$  als auch für  $J > 0$  geordnet. Da auf jede Zelle nur ein Spin entfällt, lauten die magnetischen Ordnungsvektoren  $\mathbf{Q} = (0, 0)$  sowie  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  für  $J < 0$  respektive  $J > 0$ . Damit verbunden ist die Divergenz von  $G_{\mathbf{q}}^{+-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  in  $\mathbf{Q}$  mit  $G_{\mathbf{Q}}^{+-} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}} G_{\mathbf{q}}^{+-}$ . Es folgen

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{Q}}^{+-} &= \frac{4c_{1,0}}{J(1 - 10\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0})}, \quad J < 0, \\ G_{\mathbf{Q}}^{+-} &= \frac{4c_{1,0}}{J(1 + 6\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0})}, \quad J > 0. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Entsprechend liefert das Nullsetzen des Nenners von  $G_{\mathbf{Q}}^{+-}$  die jeweils benötigte Kondensatbedingung. In einer Umgebung von  $\mathbf{Q}$  lässt sich  $G_{\mathbf{Q}}^{+-}$  darstellen als

$$G_{\mathbf{Q}+\mathbf{q}}^{+-} \approx G_{\mathbf{Q}}^{+-} \frac{1}{1 + \xi_{xx}^2 q_{xx}^2 + \xi_{yy}^2 q_y^2} \approx G_{\mathbf{Q}}^{+-} (1 - \xi_{xx}^2 q^2 - \xi_{yy}^2 q_y^2). \quad (\text{A.5})$$

Die Größen  $\xi_{xx}$  und  $\xi_{yy}$  werden als Korrelationslängen bezeichnet<sup>3</sup>, wobei die Indizierung zusätzlich die Richtung im Raum vorgibt. Mischterme der Form  $\xi_{xy}^2 q_x q_y$  tauchen in der Entwicklung nicht auf. Kompakt formuliert lauten die Definitionsgleichungen somit

$$\xi_{xx}^2 = -\frac{1}{2G_{\mathbf{Q}}^{+-}} \left. \frac{\partial^2 G_{\mathbf{q}}^{+-}}{\partial q_x^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}, \quad \xi_{yy}^2 = -\frac{1}{2G_{\mathbf{Q}}^{+-}} \left. \frac{\partial^2 G_{\mathbf{q}}^{+-}}{\partial q_y^2} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}. \quad (\text{A.6})$$

---

<sup>3</sup>Folgende Überlegung liegt der Interpretation von  $\xi$  als Korrelationslänge zugrunde: Die Korrelationsfunktionen im realen Raum, an denen man letztendlich interessiert ist, sind mit den Korrelationsfunktionen im reziproken Raum, die das Spektraltheorem liefert, über eine Fourier-Transformation verknüpft. In mathematischen Tabellenwerken [89] findet man einen diesbezüglichen Zusammenhang; er lautet

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos(xy)}{1 + (x/a)^2} dx = \pi a \exp(-ay).$$

Es gilt hier  $\xi_{xx}^2 = \xi_{yy}^2 \equiv \xi^2$ , d.h. im Gitter ist die  $x$ -Richtung gegenüber der  $y$ -Richtung nicht ausgezeichnet. Anwenden von (A.6) ergibt

$$\begin{aligned}\xi_F^2 &= \xi_{J<0}^2 = \frac{2\eta_1 c_{1,0}}{1 - 10\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0}}, \\ \xi_{AF}^2 &= \xi_{J>0}^2 = \frac{-2\eta_1 c_{1,0}}{1 + 6\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0}}.\end{aligned}\quad (\text{A.7})$$

Insbesondere die Beziehung für  $\xi_{AF}^2$  entspricht der in [81] angegebenen Formel. Das Vorzeichen von  $c_{1,0}$  sichert, daß (A.6) tatsächlich eine positive Zahl liefert<sup>4</sup>. Weil das Spinsystem im Grundzustand in beiden Fällen ferngeordnet ist, divergiert mit  $G_{\mathbf{Q}}^{+-}$  auch die dazugehörige Korrelationslänge. Die Gleichung für die jeweilige Korrelationslänge hat die Gestalt eines Bruches, in dessen Nenner die entsprechende Kondensatbedingung steht. Bei Temperaturen ungleich Null existiert keine magnetische Fernordnung, die Kondensatbedingungen sind somit nicht erfüllt und die entsprechenden Korrelationslängen werden endlich, wobei die Divergenz von  $G_{\mathbf{Q}}^{+-}$  in ein absolutes Minimum übergeht. Generell gilt also die folgende Definition: Die Korrelationslängen ergeben sich aus der Entwicklung von  $G_{\mathbf{q}}^{+-}$  gemäß (A.6) um dasjenige  $\mathbf{Q}$ , bei dem bei Abwesenheit von Fernordnung  $G_{\mathbf{q}}^{+-}$  ihr absolutes Minimum besitzt. Wie läßt sich dieses Verfahren auf Gitter mit Basis übertragen? Um eine derartige Verallgemeinerungsmöglichkeit zu finden, wird wiederum das Quadratgitter herangezogen. Die Rechnungen basieren im Unterschied zu vorher auf einem Gitter, dessen Zellen zwei Spins enthalten<sup>5</sup>. Dann ist  $G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  eine  $2 \times 2$ -Matrix. Im Grundzustand ist  $\mathbf{Q} = (0, 0)$  sowohl für  $J < 0$  als auch für  $J > 0$  der magnetische Ordnungsvektor. Weil die Frequenz- mit der Momentenmatrix vertauscht und beide Matrizen zudem hermitesch sind, gilt (3.15) mit

$$G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{m_{1\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{m_{2\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega_{2\mathbf{q}}^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{aligned}m_{1\mathbf{q}} &= -8Jc_{1,0}(1 - \gamma_{\mathbf{q}}), \\ \omega_{1\mathbf{q}}^2 &= 2J^2(1 - \gamma_{\mathbf{q}})(1 + 6\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0} - 8\eta_1 c_{1,0}(1 + \gamma_{\mathbf{q}})), \\ m_{2\mathbf{q}} &= -8Jc_{1,0}(1 + \gamma_{\mathbf{q}}), \\ \omega_{2\mathbf{q}}^2 &= 2J^2(1 + \gamma_{\mathbf{q}})(1 + 6\eta_1 c_{1,0} + 4\eta_2 c_{1,1} + 2\eta_3 c_{2,0} - 8\eta_1 c_{1,0}(1 - \gamma_{\mathbf{q}})).\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

Insofern besitzt die Matrix  $G_{\mathbf{q}}^{+-} = \lim_{\omega \rightarrow 0} G_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  die Eigenwerte  $G_{j\mathbf{q}}^{+-} = -m_{j\mathbf{q}}/\omega_{j\mathbf{q}}^2$  mit  $j = 1, 2$ . Untersucht man diese Eigenwerte in der Umgebung des gemeinsamen Ordnungsvektors  $\mathbf{Q} = (0, 0)$  nach (A.6), so erhält man überraschenderweise die ferromagnetische Korrelationslänge  $\xi_F^2$  sowie die antiferromagnetische Korrelationslänge  $\xi_{AF}^2$  nach (A.7) aus  $G_{1\mathbf{q}}^{+-}$  respektive  $G_{2\mathbf{q}}^{+-}$ . Im Grundzustand divergiert je nach dem, welches Vorzeichen  $J$  hat, einer der Eigenwerte. Eine sinnvoll erscheinende Verallgemeinerung der Berechnungsvorschrift für die Korrelationslänge auf Gitter mit Basis könnte demzufolge wie folgt zu formulieren sein: Ausgehend vom Eigenwertspektrum der Matrix  $G_{\mathbf{q}}^{+-}$ ,

<sup>4</sup>Der Nenner ist entweder Null oder positiv, weil er vom Spektrum  $\omega_{\mathbf{q}}^2 \geq 0$  herröhrt.

<sup>5</sup>Für  $J > 0$  handelt es sich also um das magnetische Gitter.

ist (A.6) auf denjenigen Eigenwert anzuwenden, der bei einem bestimmten  $\mathbf{Q}$  das absolute Minimum<sup>6</sup> bezüglich aller Eigenwerte und aller  $\mathbf{q}$  liefert. Einzelne Matrixelemente herauszugreifen, um sie zu entwickeln, ist dagegen eine wenig geeignete Methode, weil ein jedes Matrixelement seine eigenen Entwicklungskoeffizienten gemäß (A.5) aufweist, zumal bei komplizierteren Gittern Mischterme in der Entwicklung nicht auszuschließen sind. Mischterme treten nach Erfahrung des Autors dann nicht in Erscheinung, wenn man sich an die Eigenwerte hält. Abschließend sei nochmals ausdrücklich betont, daß es sich vorrangig um formale Argumente handelt, auf denen die Verallgemeinerung der Berechnungsvorschrift beruht. Zur Untermauerung sei deshalb zusätzlich auf die spektrale Zerlegung der Korrelatorenmatrix (3.16) verwiesen. Derjenige Eigenwert, der bei einem bestimmten  $\mathbf{Q}$  das absolute Minimum aller  $G_{j\mathbf{q}}^{+-}$  bereitstellt, sorgt gleichzeitig dafür, daß der entsprechende Beitrag in  $c_{\mathbf{q}}$  die übrigen dominiert.

## A.4 Nichtlineares Gleichungssystem im Tieftemperaturregime

Das Tieftemperaturverhalten der spezifischen Wärme ist für ein Spinsystem charakteristisch. Die spezifische Wärme gehorcht im allgemeinen einem Potenzgesetz in  $T$ , dessen Exponent von der Gitterdimension und dem Vorzeichen der einzelnen Kopplungen abhängt. Während sich derartige Potenzgesetze innerhalb der LSWT analytisch bestimmen lassen, stellt die dahingehende Auswertung der selbstkonsistenten RGM-Lösungen im Tieftemperaturregime insbesondere dann ein numerisches Problem dar, wenn sich die Lösungen nur schwach mit der Temperatur ändern<sup>7</sup>. Wie man sich dennoch behelfen kann und was man dabei nicht tun darf, demonstrieren zwei Beispiele im Anschluß. Dazu sei zunächst das nichtlineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{a}{1-x^2} + \frac{x^2}{c_1+c_2}, \\ c_2 &= \frac{b}{1-x^2} + \frac{x^2}{c_1+c_2} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

betrachtet. Gesucht sind die Lösungen  $c_1$  und  $c_2$  in Abhängigkeit von  $x$ . Eine Lösung lautet

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{a}{1-x^2} + \frac{x^2}{\frac{a+b}{2(1-x^2)} + \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{a+b}{1-x^2}\right)^2 + 8x^2}}, \\ c_2 &= \frac{b}{1-x^2} + \frac{x^2}{\frac{a+b}{2(1-x^2)} + \frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{a+b}{1-x^2}\right)^2 + 8x^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

---

<sup>6</sup>Man kann in (A.6) statt mit  $G_{\mathbf{q}}^{+-}$  auch mit der statischen Suszeptibilität  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}$  rechnen. Wegen  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-} = -G_{\mathbf{q}}^{+-}$  ist bei Gittern mit Basis nach dem absoluten Maximum aller Eigenwerte der Matrix  $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}$  zu suchen.

<sup>7</sup>Im allgemeinen sind die ersten Temperaturkorrekturen der Energie bei einem  $d$ -dimensionalen Spinsystem proportional zu  $T^{(d+2)/2}$  für einen Ferromagneten und proportional zu  $T^{d+1}$  für einen Antiferromagneten. Entsprechend verschieben sich mit zunehmender Dimensionalität die maßgeblichen Nachkommastellen nach hinten. Umso mehr kommt es also auf die Genauigkeit an, wenn diese Stellen richtig erfaßt werden sollen. Andererseits erfordert genaueres Integrieren mehr Rechenzeit  $t$  mit  $t \sim t_0^d$ .

Für sie existiert eine Taylor-Entwicklung um den Punkt  $x = 0$ , die an dieser Stelle bis zur zweiten Ordnung - der ersten Korrektur - ausgewertet wird. Daß einfaches Einsetzen der Lösung für  $x = 0$  in (A.9) mit  $c_1 \approx a + x^2 / (a + b)$  sowie  $c_2 \approx b + x^2 / (a + b)$  gerade nicht die richtigen ersten beiden Taylor-Glieder liefert, zeigt die genauere Analyse. Vielmehr folgt aus (A.10)

$$\begin{aligned} c_1 &\approx a + \left( a + \frac{1}{a+b} \right) x^2, \\ c_2 &\approx b + \left( b + \frac{1}{a+b} \right) x^2. \end{aligned}$$

Dieses Resultat ist natürlich sofort einleuchtend, denn die Entwicklung der Funktion  $1 / (1 - x^2)$  besitzt bereits ihrerseits Glieder zweiter Ordnung. Es darf demzufolge nicht erwartet werden, daß sich die Tieftemperaturkorrekturen im Rahmen der RGM einfach dadurch ergeben, daß man den explizit temperaturabhängigen Anteil von jeder Gleichung abspaltet, ihn entwickelt und anschließend die Grundzustandslösungen einsetzt, zumal die impliziten Temperaturabhängigkeiten verborgen bleiben, welche - wie schon obiges Beispiel illustriert, bei dem die Abhängigkeit von  $x$  ins Auge sticht - letztendlich zu einer Modifikation der Vorfaktoren führen. Deshalb ist folgendes Vorgehen sinnvoll: Das gesamte Gleichungssystem wird einer Tieftemperaturentwicklung unterzogen und danach selbstkonsistent gelöst. Bereits die Tieftemperaturentwicklung der Gleichungen bringt dabei die richtigen Temperaturabhängigkeiten, zumindest was den Exponenten betrifft, zutage. Zur Untermauerung dessen soll ein zweites Beispiel dienen. Untersucht wird das Tieftemperaturverhalten der spezifischen Wärme des HAFM auf der linearen Kette im Rahmen der RGM. Auf den Grundzustand ist bereits in Abschnitt 3.2.5 eingegangen worden. Für endliche Temperaturen lautet das zu lösende Gleichungssystem

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}12} \cos q_x dq_x, \quad c_2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}11} \cos 2q_x dq_x, \\ \frac{1}{2} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} c_{\mathbf{q}11} dq_x \end{aligned} \tag{A.11}$$

mit

$$c_{\mathbf{q}\alpha\beta} = \sum_{j=1}^2 \frac{m_{j\mathbf{q}}}{2\omega_{j\mathbf{q}}} (1 + 2n(\omega_{j\mathbf{q}})) \langle \alpha | j\mathbf{q} \rangle \langle j\mathbf{q} | \beta \rangle.$$

Dabei sind  $m_{j\mathbf{q}}$  und  $\omega_{j\mathbf{q}}$  (3.20) zu entnehmen. Die normierten Eigenvektoren  $|j\mathbf{q}\rangle$  hängen nicht von  $\mathbf{q}$  ab und sind durch

$$|1\mathbf{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |2\mathbf{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{A.12}$$

gegeben. Außerdem gilt für  $\alpha, \beta = 1, 2$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{A.13}$$

Explizit ist die Temperatur im Ausdruck

$$n(\omega_{j\mathbf{q}}) = 1 / (\exp(\omega_{j\mathbf{q}}/kT) - 1)$$

enthalten. Im Prinzip hängt die Genauigkeit der Lösung des Gleichungssystems davon ab, wie genau die Integrale bekannt sind. Hier handelt es sich um eindimensionale Integrale. Demzufolge kann das Gleichungssystem beliebig genau in endlicher Zeit gelöst werden. Numerisches Ableiten der Energie  $E = 3JNc_1/2$  nach der Temperatur bereitet also keine Schwierigkeiten, da die relevanten Nachkommastellen korrekt und verlässlich bestimmt werden können. Für zwei Dimensionen ist dies schon schwieriger, jedoch stellt das nahezu beliebig genaue Integrieren in drei Dimensionen ein Problem dar. Aus diesem Grunde werden in einem ersten Schritt die explizit temperaturabhängigen Terme innerhalb des Gleichungssystems ausintegriert, was für kleine  $T$  analytisch möglich ist und den richtigen Exponenten, mit dem  $T$  auftritt, bereits liefert. In einem zweiten Schritt wird das korrigierte Gleichungssystem numerisch gelöst. Ein solches Vorgehen ist bei einem eindimensionalen Spinsystem aus den eben genannten Gründen unnötig, dennoch soll die folgende Rechnung zeigen, wie gut das exakte Ergebnis mit dem genäherten übereinstimmt. Gilt  $J > 0$ , so werden bei tiefen Temperaturen die ersten Anregungen durch die akustische Mode  $\omega_{1\mathbf{q}}$  beschrieben. Dann folgt unter Beachtung der Eigenschaft, daß die Integranden gerade Funktionen in  $\mathbf{q}$  sind, Näherungsweise

$$\begin{aligned} c_1 &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|2\rangle \cos q_x dq_x \\ &+ \frac{4}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \omega_{1\mathbf{q}} \chi_{1\mathbf{q}} n(\omega_{1\mathbf{q}}) \langle 1|1\mathbf{q}\rangle \langle 1\mathbf{q}|2\rangle \cos q_x dq_x, \\ c_2 &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|1\rangle \cos 2q_x dq_x \\ &+ \frac{4}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \omega_{1\mathbf{q}} \chi_{1\mathbf{q}} n(\omega_{1\mathbf{q}}) \langle 1|1\mathbf{q}\rangle \langle 1\mathbf{q}|1\rangle \cos 2q_x dq_x, \\ \frac{1}{2} &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|1\rangle dq_x \\ &+ \frac{4}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \omega_{1\mathbf{q}} \chi_{1\mathbf{q}} n(\omega_{1\mathbf{q}}) \langle 1|1\mathbf{q}\rangle \langle 1\mathbf{q}|1\rangle dq_x \end{aligned}$$

mit  $\chi_{j\mathbf{q}} = m_{j\mathbf{q}}/2\omega_{j\mathbf{q}}^2$ . Wegen (A.12) und (A.13) erfolgt die Tieftemperaturkorrektur für alle drei Gleichungen in gleicher Weise, denn einerseits gilt  $\langle 1|1\mathbf{q}\rangle \langle 1\mathbf{q}|2\rangle = \langle 1|1\mathbf{q}\rangle \langle 1\mathbf{q}|1\rangle = 1/2$  und andererseits sind für  $kT \ll J$  nur Zustände mit kleinem  $q_x$  angeregt, so daß die Integranden, die  $n(\omega_{1\mathbf{q}})$  enthalten, in geeigneter Form Taylorentwickelt werden. Daß dabei die Integration ins Unendliche ausgedehnt werden kann, versteht sich von selbst. Somit ist die Tieftemperaturkorrektur unter Verwendung von  $\chi = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \chi_{1\mathbf{q}}$ ,  $\omega_{1\mathbf{q}} \approx \sqrt{a}q_x$  und  $\cos(q_x) \approx \cos(2q_x) \approx 1$  für alle drei Gleichungen identisch und durch

$$\frac{2\sqrt{a}\chi}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{q_x}{\exp(\sqrt{aq_x}/kT) - 1} dq_x$$

gegeben, wobei  $a = J^2(1 - 2\eta(3c_1 - c_2))/2$  gilt und  $\chi = -c_1 J/a$  der Beziehung (3.28) entspricht. Ausführen der Integration liefert

$$-\frac{Jc_1\pi}{3a\sqrt{a}} (kT)^2.$$

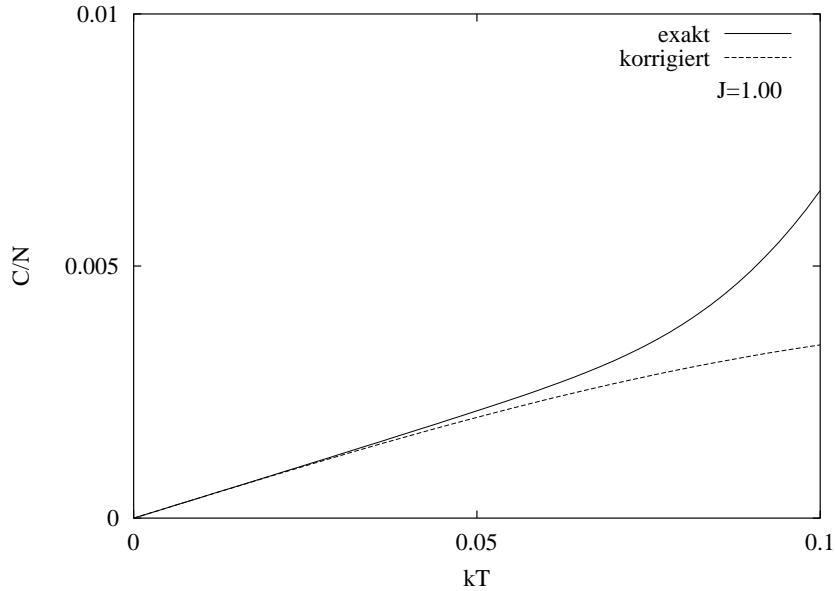


Abbildung A.1: RGM: Spezifische Wärme für die lineare Kette mit  $J = 1.00$ . Einander gegenübergestellt sind die Ergebnisse, die man exakt aus dem unkorrigierten Gleichungssystem und genähert aus dem korrigierten Gleichungssystem gewinnt.

Damit erhält man ein tieftemperaturkorrigiertes Gleichungssystem gemäß

$$\begin{aligned}
 c_1 &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|2\rangle \cos q_x dq_x - \frac{Jc_1\pi}{3a\sqrt{a}} (kT)^2, \\
 c_2 &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|1\rangle \cos 2q_x dq_x - \frac{Jc_1\pi}{3a\sqrt{a}} (kT)^2, \\
 \frac{1}{2} &\approx \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \sum_{j=1}^2 \omega_{j\mathbf{q}} \chi_{j\mathbf{q}} \langle 1|j\mathbf{q}\rangle \langle j\mathbf{q}|1\rangle dq_x - \frac{Jc_1\pi}{3a\sqrt{a}} (kT)^2. \tag{A.14}
 \end{aligned}$$

In Abb. A.1 ist die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur dargestellt. Offensichtlich stimmen die Lösungen von (A.11) mit denen von (A.14) bei hinreichend tiefen Temperaturen praktisch überein. In diesem Regime ist die spezifische Wärme der Temperatur direkt proportional; die  $T^2$ -Abhängigkeit der Temperaturkorrektur überträgt sich erwartungsgemäß auf die Korrelatoren und damit auf die Energie. Einsetzen der Grundzustandslösung in die Tieftemperaturkorrektur liefert mit  $C/N = 0.286kT/J$  gerade den falschen Vorfaktor. Tatsächlich verhält sich die spezifische Wärme wie  $C/N = 0.042kT/J$ . Zum Vergleich sei noch das Ergebnis einer linearen Spinwellenrechnung angegeben; auch im Rahmen dieser Theorie ist die spezifische Wärme der Temperatur direkt proportional. Man findet  $C/N = 2\pi kT/3J = 2.094kT/J$  für  $s = 1/2$ . Der Vorfaktor ist vergleichsweise groß, was vermutlich mit den Magnonen zusammenhängt, die in der LSWT keiner Wechselwirkung unterliegen.

## Anhang B

# LSWT für das Quadratgitter mit modifizierten Kopplungen

Welche Probleme die LSWT mit der Beschreibung von Phasenübergängen hat, soll anhand eines Beispiels demonstriert werden. Dazu wird das Quadratgitter mit modifizierten Kopplungen untersucht. Es besteht aus  $N$  Spins der Länge  $s$ . Zwischen nächsten Nachbarn in  $\mathbf{a}_1$ -Richtung wirkt  $J_x$ . Entsprechendes gilt für nächste Nachbarn in  $\mathbf{a}_2$ -Richtung vermittels  $J_y$ . Wird eine der Kopplungen Null, so handelt es sich um lineare Ketten. Offensichtlich führt das Gleichsetzen der Kopplungen auf das übliche Quadratgitter mit räumlich isotroper Wechselwirkung, d.h., es besteht kein Unterschied zwischen  $x$ - und  $y$ -Richtung. Unterschieden werden die Fälle  $J_x < 0$  sowie  $J_x > 0$  jeweils mit variablem  $J_y > 0$ . Dann genügt immer eine Ein-Magnonen-Theorie, da jedesmal ein klassischer Ordnungsvektor  $\mathbf{Q}$  existiert. Die numerische Auswertung der Gleichungen beschränkt sich auf den extremen Quantenfall  $s = 1/2$ . Der Fall  $J_x > 0$  wird für beliebiges  $s$  in [15] diskutiert.

**Der Fall  $J_x < 0$  und  $J_y > 0$ :** Als Hamilton-Operator ergibt sich

$$\begin{aligned} H &= (J_x - J_y) N s^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\ H_{\mathbf{q}} &= 2s(-J_x(1 - \cos q_x) + J_y) a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \\ &\quad - J_y s \exp(-iq_y) a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ - J_y s \exp(iq_y) a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Eine kurze Rechnung liefert die zur Bestimmung der Magnetisierung nötige Greensche Funktion  $G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \langle \langle a_{1\mathbf{q}}; a_{1\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_\omega$  zu

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-2J_x s (1 - \cos q_x) + 2J_y s + \omega}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2}$$

mit

$$\omega_{1\mathbf{q}} = 2s \sqrt{(-J_x(1 - \cos q_x) + J_y(1 + \cos q_y))(-J_x(1 - \cos q_x) + J_y(1 - \cos q_y))}. \quad (\text{B.2})$$

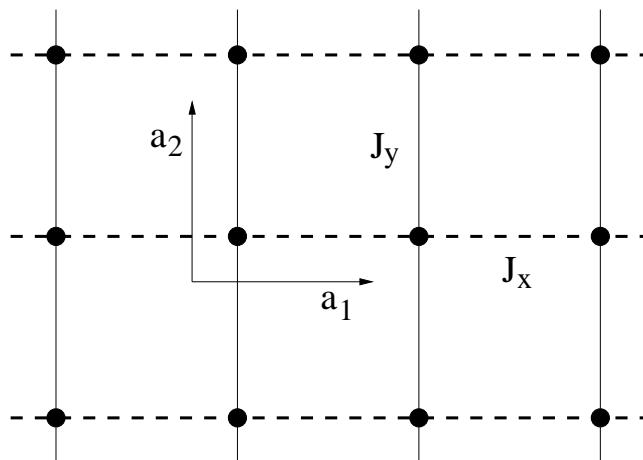


Abbildung B.1: Das Quadratgitter mit modifizierten Kopplungen  $J_x$  und  $J_y$ . Die geometrische Elementarzelle wird durch  $\mathbf{a}_1 = (1, 0)$  sowie  $\mathbf{a}_2 = (0, 1)$  aufgespannt. Sie enthält einen Spin.

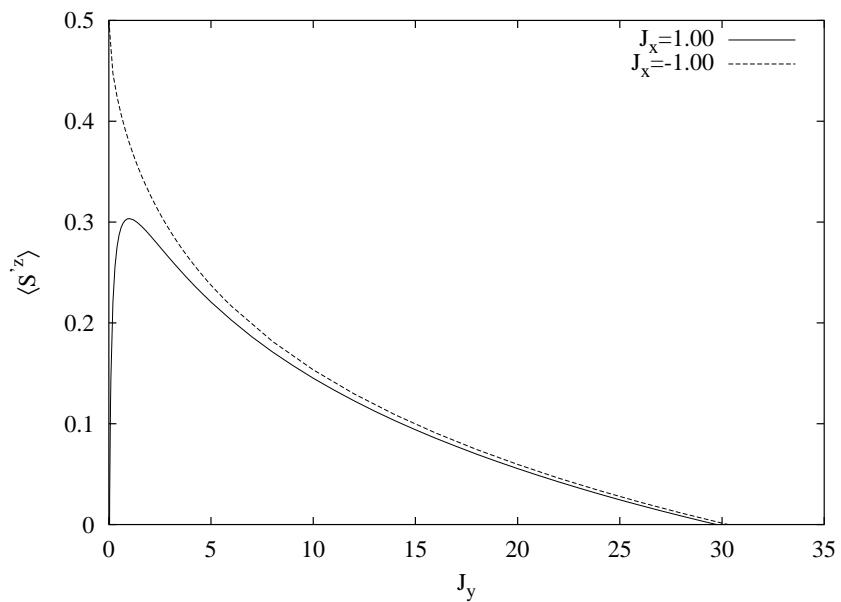


Abbildung B.2: LSWT: Die Magnetisierung  $\langle S'z \rangle$  des modifizierten Quadratgitters als Funktion von  $J_y$  für  $s = 1/2$  im Grundzustand.

Im Grundzustand erhält man letztendlich die Magnetisierung<sup>1</sup> gemäß

$$\begin{aligned}\langle S'^z \rangle &= s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}, \\ A_{\mathbf{q}} &= \frac{-2J_x s (1 - \cos q_x) + 2J_y s - \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}.\end{aligned}\quad (\text{B.3})$$

**Der Fall  $J_x > 0$  und  $J_y > 0$ :** In diesem Fall findet man den bosonischen Hamilton-Operator zu

$$\begin{aligned}H &= -(J_x + J_y) N s^2 + \sum_{\mathbf{q}} H_{\mathbf{q}}, \\ H_{\mathbf{q}} &= 2s (J_x + J_y) a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1\mathbf{q}} \\ &\quad - J_x s \exp(-iq_x) a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ - J_x s \exp(iq_x) a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}} \\ &\quad - J_y s \exp(-iq_y) a_{1\mathbf{q}}^+ a_{1-\mathbf{q}}^+ - J_y s \exp(iq_y) a_{1\mathbf{q}} a_{1-\mathbf{q}}.\end{aligned}\quad (\text{B.4})$$

Jetzt gilt

$$G_{11}^{-+}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2J_x s + 2J_y s + \omega}{\omega^2 - \omega_{1\mathbf{q}}^2}$$

mit

$$\omega_{1\mathbf{q}} = 2s \sqrt{(J_x(1 + \cos q_x) + J_y(1 + \cos q_y))(J_x(1 - \cos q_x) + J_y(1 - \cos q_y))}, \quad (\text{B.5})$$

womit die Magnetisierung im Grundzustand durch

$$\begin{aligned}\langle S'^z \rangle &= s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}, \\ A_{\mathbf{q}} &= \frac{2J_x s + 2J_y s - \omega_{1\mathbf{q}}}{2\omega_{1\mathbf{q}}}\end{aligned}\quad (\text{B.6})$$

gegeben ist.

In Abb. B.2 ist die Magnetisierung als Funktion von  $J_y$  aufgetragen. In diesem simplen Modell sagt die LSWT einen Phasenübergang voraus. Im Falle von  $J_x > 0$  sind es sogar zwei, denn aus  $\langle S'^z \rangle = 0$  für  $J_y/J_x \approx 30$  folgt aus Symmetriegründen ebenfalls  $\langle S'^z \rangle = 0$  für  $J_x/J_y \approx 30$ . Gemäß [15] ist die LSWT aber nur dann verlässlich, wenn beide Kopplungen dieselbe Größenordnung besitzen. Es wird weiterhin argumentiert, daß die Existenz kritischer Kopplungen auch damit zusammenhängt, ob  $s$  entsprechend der Haldane-Vermutung [4] ganz- oder halbzahlig ist. Die LSWT macht bezüglich  $s$  keinen Unterschied, weil  $s$  nur als einfacher Parameter eingeht, von dem die erste Quantenkorrektur des Ordnungsparameters gar nicht abhängt. Ein Molekularfeldzugang [15] liefert hingegen für  $J_x > 0$  und  $s = 1/2$  folgendes

---

<sup>1</sup>Die Magnetisierung ist der Erwartungswert der lokalen  $z$ -Komponente. In seinem lokalen Koordinatensystem zeigt ein Spin in seine lokale  $z$ -Richtung. Zur Unterscheidung von einem globalen Koordinatensystem ist der Erwartungswert der lokalen  $z$ -Komponente mit einem Strich versehen. Siehe dazu auch Abschnitt 2.1.1, wo die Holstein-Primakoff-Transformation behandelt wird.

Bild: Eine beliebig kleine Zwischenkettenkopplung genügt, um magnetische Ordnung herzustellen. Das quasizweidimensionale Spinsystem ordnet sich also spontan. Ganz anders ist das Verhalten, wenn  $s = 1$  gilt. Hier muß die Zwischenkettenkopplung erst einen endlichen kritischen Wert ( $J_y/J_x \approx 40$  bzw.  $J_x/J_y \approx 40$ ) übersteigen, bevor sich das System ordnet [15]. Insbesondere für  $s = 1/2$  sind die ermittelten Phasenübergänge als Artefakte der LSWT einzustufen. Es ist daher zu vermuten, daß die Phasenübergänge, die man mit der LSWT und der RGM im Falle des geschichteten Kagomé-Gitters für  $J_{||} < 0, J_{\perp} > 0$  findet, nicht der Realität entsprechen.

# Anhang C

## Numerische Integration

Im thermodynamischen Limes geht die Summe  $\sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}$  mit

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} = \frac{1}{V_{BRZ}} \int_{V_{BRZ}} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q}$$

in ein Integral über. Dabei sind  $V_{BRZ}$  das Volumen und  $N$  die Zahl der Punkte innerhalb der ersten Brillouin-Zone. Zur numerischen Auswertung derartiger Integrale wird in dieser Arbeit die Gauß-Quadratur benutzt [89]. Die entsprechenden Näherungsformeln sind genau dann sehr einfach zu implementieren, wenn sich die Integration über das Intervall  $[-1, +1]$  erstreckt. Um also auf möglichst einfache Weise numerisch integrieren zu können, ist die erste Brillouin-Zone entsprechend dieser Maßgabe zu transformieren. Am Beispiel des Dreiecksgitters nach Abb.C.1 soll dies kurz demonstriert werden. Der Einfachheit halber sei angenommen, daß  $f(\mathbf{q})$  eine gerade Funktion in  $\mathbf{q}$  ist<sup>1</sup>. In der Folge genügt es, über die halbe Brillouin-Zone zu integrieren, so daß mit  $V_{BRZ} = 8\pi^2/\sqrt{3}$  gilt

$$\frac{1}{V_{BRZ}} \int_{V_{BRZ}} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi^2} \int_0^{\frac{+2\pi}{\sqrt{3}}} \int_{-\frac{4\pi}{3} + \frac{q_x}{\sqrt{3}}}^{\frac{4\pi}{3} - \frac{q_x}{\sqrt{3}}} f(q_x, q_y) dq_x dq_y.$$

Die Koordinatentransformation  $q_x = \pi(1+x)/\sqrt{3}$ ,  $q_y = \pi(3-x)y/3$  bildet die rechte Hälfte der ersten Brillouin-Zone - wie gewünscht - auf das Gebiet  $x, y \in [-1, +1]$  ab. Gleichzeitig transformiert sich das Flächenelement  $dq_x dq_y$  gemäß

$$dq_x dq_y = \frac{\pi^2}{\sqrt{27}} (3-x) dx dy.$$

Damit hat das Integral die Gestalt

$$\frac{1}{12} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} (3-x) f(q_x(x, y), q_y(x, y)) dx dy. \quad (\text{C.1})$$

---

<sup>1</sup>Wenn es darauf ankommt, die Rechenzeit bei gleichbleibender Genauigkeit bzw. bei gleicher Rechenzeit die Genauigkeit zu optimieren, dann sind entsprechende Symmetriebetrachtungen im voraus von großem Nutzen.

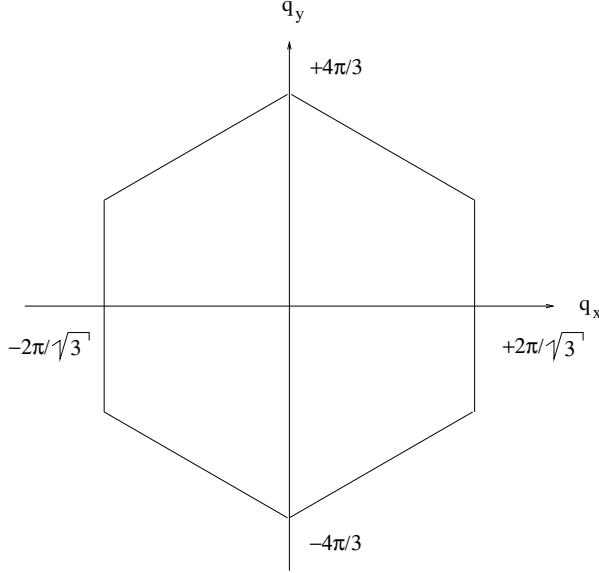


Abbildung C.1: Die erste Brillouin-Zone des Dreiecksgitters.

Zur weiteren numerischen Auswertung von (C.1) wird das gesamte Integrationsgebiet in kleine Zellen zerlegt; der Parameter  $n$  kontrolliert dabei die Größe der Zellen und damit die Genauigkeit. Die Zelle  $k, l$  ist dann gegeben durch  $x \in [x_0, x_k], y \in [y_0, y_l]$  mit

$$\begin{aligned} x_0 &= -1 + \frac{2(k-1)}{n}, & x_k &= -1 + \frac{2k}{n}, \\ y_0 &= -1 + \frac{2(l-1)}{n}, & y_l &= -1 + \frac{2l}{n} \end{aligned}$$

und  $k, l = 1, 2, \dots, n$ . Die eigentliche Anwendung der Gauß-Quadratur geschieht nun, indem die Zelle  $k, l$  selbst auf ein Gebiet  $x, y \in [-1, +1]$  abgebildet wird, wobei die Drei-Punkte-Formel zur Anwendung kommen soll. Dann lauten die Stützstellen

$$x_u = \frac{(x_k - x_0)uw + (x_k + x_0)}{2}, \quad y_v = \frac{(y_l - y_0)vw + (y_l + y_0)}{2}$$

mit  $u, v = -1, 0, +1$  und  $w = \sqrt{3}/5$ . Versehen mit den Gewichten  $5/9$  für  $u, v = \pm 1$  und  $8/9$  für  $u, v = 0$  ergibt sich das Integral zu

$$\frac{1}{972} \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \sum_{u=-1}^1 \sum_{v=-1}^1 (3 - x_u)(8 - 3|u|)(8 - 3|v|) f(q_x(x_u, y_v), q_y(x_u, y_v)). \quad (\text{C.2})$$

Erfahrungsgemäß genügt bei der Berechnung von Korrelationsfunktionen ein zweistelliges  $n$ , um eine hinreichende Genauigkeit von fünf bis sechs Stellen zu erreichen. Dagegen erfordert die Bestimmung der Magnetisierung zumindest ein dreistelliges  $n$ , da der entsprechende Integrand Divergenzen besitzt, die zwar in zwei Dimensionen durch das Flächenelement ausgeglichen werden, trotzdem aber die Konvergenz verzögern.

# Literaturverzeichnis

- [1] W. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619 (1928).
- [2] J.H. van Vleck, The Theory of Electric and Magnetic Suszeptibilities, Oxford (1932).
- [3] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **276**, 238 (1963).
- [4] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. A **93**, 464 (1983).
- [5] E.F. Shender, Sov. Phys. JETP **56**, 178 (1982).
- [6] J. Villain, R. Bidaux, J.P. Caron, R. Conte, J. Physique **41**, 1263 (1980).
- [7] K. Kubo, T. Kishi, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 567 (1991).
- [8] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [9] P.W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [10] J. Bardeen, L. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [11] C. Lhuillier, P. Sindzingre, J.B. Fouet, Can. J. Phys. **79**, 1525 (2001).
- [12] R. Moessner, Can. J. Phys. **79**, 1283 (2001).
- [13] G. Misguich, C. Lhuillier, *Two-dimensional quantum-antiferromagnets*, cond-mat/0310405, (2003).
- [14] J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, *Quantum magnetism in two dimensions: From semi-classical Néel order to magnetic disorder*, in *Quantum magnetism*, U. Schöllwöck, J. Richter, D.J.J. Farnell, R.F. Bishop, Eds (Lecture Notes in Physics, Vol.645, Springer Verlag Berlin, (2004)).
- [15] T. Sakai, M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3131 (1989).
- [16] D.D. Betts, Proc.N.S.Inst.Sci. **40**, 95 (1995).
- [17] S.J. Miyake, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 983 (1992).
- [18] H. Nishimori, S.J. Miyake, Prog. Theor. Phys. **73**, 18 (1985).
- [19] R. Deutscher, Dissertation, Universität Hannover (1993).

- [20] A.C. Chubukov, S. Sachdev, T. Senthil, Nucl. Phys. B **426**, 601 (1994).
- [21] C. Zeng, V. Elser, Phys. Rev. B **42**, 8436 (1990).
- [22] R.R.P. Singh, D.A. Huse, Phys. Rev. Lett. **68**, 1766 (1992).
- [23] J.T. Chalker, J.F.G. Eastmond, Phys. Rev. B **46**, 14201 (1992).
- [24] P.W. Leung, V. Elser, Phys. Rev. B **47**, 5459 (1993).
- [25] K. Yang, L.K. Warman, S.M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **70**, 2641 (1993).
- [26] P. Sindzingre, P. Lecheminant, C. Lhuillier, Phys. Rev. B **50**, 3108 (1994).
- [27] S. Sachdev, Phys. Rev. B **45**, 12377 (1992).
- [28] B.H. Bernhard, B. Canals, C. Lacroix, Phys. Rev. B **66**, 024422 (2002).
- [29] W. Yu, S. Feng, Eur. Phys. J. B **13**, 265 (2000).
- [30] P. Chandra, B. Doucot, Phys. Rev. B **38**, 9335 (1988).
- [31] L. Siurakshina, D. Ihle, R. Hayn, Phys. Rev. B **64**, 104406 (2001).
- [32] J. Richter, Phys. Rev. B **47**, 5794 (1993).
- [33] O.P. Sushkov, J. Oitmaa, W. Zheng, Phys. Rev. B **63**, 104420 (2001).
- [34] R. Schmidt, J. Schulenburg, J. Richter, D.D. Betts, Phys. Rev. B **66**, 224406 (2002).
- [35] N. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [36] F.J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956); **102**, 1230 (1956);  
S.V. Maleev, Sov. Phys. JETP **6**, 776 (1958).
- [37] T. Holstein, H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
- [38] S.W. Tjablikov, Quantentheoretische Methoden des Magnetismus, B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig (1968).
- [39] K. Elk, W. Gasser, Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik, Akademie-Verlag, Berlin (1979).
- [40] S.E. Krüger, Dissertation, Universität Magdeburg (2000).
- [41] S.Noro, H.Suzuki, T. Yamada, Solid State Commun. **76**, 711 (1990);  
S. Noro, T. Kouchi, H. Harada, T. Yamada, M. Tadokoro, H. Suzuki, Mater. Sci. Eng. B **25** (1994), 167.
- [42] K. Yamada, N. Suzuki, J. Akimitsu, Physica B **213-214**, 191 (1995).
- [43] F.C. Chou, A. Aharony, R.J. Birgeneau, O. Entin-Wohlman, M. Greven, A.B. Harris, M.A. Kastner, Y.J. Kim, D.S. Kleinberg, Y.S. Lee, Q. Zhu, Phys. Rev. Lett. **78**, 535 (1997).

- [44] Y.J. Kim, R.J. Birgeneau, F.C. Chou, M. Greven, M.A. Kastner, Y.S. Lee, B.O. Wells, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, I.Y. Korenblit, A.B. Harris, R.W. Erwin, G. Shirane, Phys. Rev. B **64**, 024435 (2001).
- [45] A.B. Harris, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, I.Y. Korenblit, R.J. Birgeneau, Y.J. Kim, Phys. Rev B **64**, 024436 (2001).
- [46] T.V. Valyanskaya and V.I. Sokolov, Sov. Phys. JETP **48**, 161 (1978).
- [47] Th. Brückel, C. Paulsen, K. Hinrichs and W. Prandl, Z. Phys. B **97**, 391 (1995).
- [48] H. Rosner, R. Hayn and J. Schulenburg, Phys. Rev. B **57**, 13660 (1998).
- [49] D. Schmalfuß, R. Herms, J. Richter, J. Schulenburg, J. Phys.: Condens. Matter **15**, 2667 (2003).
- [50] R. Herms, Diplom, Universität Magdeburg (2002).
- [51] N.B. Ivanov, J. Richter and D.J.J. Farnell, Phys. Rev B **66**, 014421 (2002).
- [52] R.P. Feynman, Phys. Rev. **56**, 340 (1939).
- [53] P.W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [54] Z. Weihong, C. Hamer, Phys. Rev. B **47**, 7961 (1993).
- [55] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).
- [56] D.M. Deaven, D.S. Rokhsar, Phys. Rev. B **53**, 14966 (1996).
- [57] A. Mattsson, P. Fröjd, T. Einarsson, Phys. Rev. B **49**, 3997 (1994).
- [58] P.W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8** 153 (1973).
- [59] P. Fazekas, P.W. Anderson, Philos. Mag. **30**, 423 (1974).
- [60] B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, Phys. Rev. Lett. **69**, 2590 (1992).
- [61] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, L. Pierre, Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
- [62] L. Capriotti, A.E. Trumper, S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **82**, 3899 (1999).
- [63] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, P. Sindzingre, Phys. Rev. B **56**, 2521 (1997).
- [64] Ch. Waldtmann, H.U. Everts, B. Bernu, P. Sindzingre, C. Lhuillier, P. Lecheminant, L. Pierre, Eur. Phys. J. B **2**, 501 (1998).
- [65] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, Phys. Rev. B **52**, 9162 (1995).
- [66] A.B. Harris, C. Kallin, A.J. Berlinsky, Phys. Rev. B **45**, 2899 (1992).
- [67] H. Asakawa, M. Suzuki, Physica A **205**, 687, (1994).

- [68] C. Broholm, G. Aeppli, G.P. Espinosa, A.S. Cooper, Phys. Rev. Lett. **65**, 3173 (1990).
- [69] J. Schulenburg, Dissertation, Universität Magdeburg (2003).
- [70] A. Chubukov, Phys. Rev. Lett. **69**, 832 (1992).
- [71] J.T. Chalker, P.C.W. Holdsworth, E.F. Shender, Phys. Rev. Lett. **68**, 855 (1992).
- [72] D.A. Huse, V. Elser, Phys. Rev. B **47**, 5459 (1993).
- [73] J.N. Reimers, A.J. Berlinsky, Phys. Rev. B **48**, 9539 (1993).
- [74] J. Schulenburg, J. Richter, D.D. Betts, Acta Phys. Pol. A **97**, 971 (2000).
- [75] D. Schmalfuß, P. Tomczak, J. Schulenburg, J. Richter, Phys. Rev. B **65**, 224405 (2002).
- [76] L. Challis, F. Sheard, Physics Today **56**, 41 (2003).
- [77] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [78] J. Kondo, K. Yamaji, Prog. Theor. Phys. **47**, 807 (1972).
- [79] L. Hulthén, Ark. Mat. Astro. Fys. **26**, 11 (1938).
- [80] H. Shimahara, S. Takada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 2394 (1991).
- [81] S. Winterfeldt, D. Ihle, Phys. Rev. B **56**, 5535 (1997).
- [82] A.F. Barabanov, V.M. Berezovskii, JETP **79**, 627 (1994).
- [83] L. Siurakshina, D. Ihle, R. Hayn, Phys. Rev. B **61**, 14601 (2000).
- [84] C. Schindelin, H. Fehske, H. Büttner, D. Ihle, Phys. Rev. B **62**, 12141 (2000).
- [85] D. Ihle, C. Schindelin, A. Weiße, H. Fehske, Phys. Rev. B **60**, 9240 (1999).
- [86] S. Winterfeldt, D. Ihle, Phys. Rev. B **58**, 9402 (1998).
- [87] D. Ihle, C. Schindelin, H. Fehske, Phys. Rev. B **64**, 054419 (2001).
- [88] S. Feng, Y. Song, Phys. Rev. B **55**, 642 (1997).
- [89] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, Taschenbuch der Mathematik, B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart Leipzig und Verlag Nauka, Moskau (1991).
- [90] J. Richter, S.E. Krüger, A. Voigt, C. Gros, Europhys. Lett. **28**, 363 (1994).

# Lebenslauf

Dirk P. Schmalfuß  
Gerhart-Hauptmann-Straße 15  
39108 Magdeburg

## Persönliche Angaben

geboren am: 26.01.1972  
geboren in: Freiberg  
Familienstand: ledig, eine Tochter  
Staatsangehörigkeit: BRD

## Bildungsweg

1978 bis 1988: Polytechnische Oberschule "Käthe Kollwitz" Salzwedel  
1988 bis 1990: Spezialklasse für Mathematik und Naturwissenschaften  
an der Technischen Universität Otto-von-Guericke Magdeburg  
Schulabschluß: Abitur  
1990 bis 1991: Grundwehrdienst  
1991 bis 1997: Studium der Physik an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
Studienabschluß: Diplom-Physiker  
seit 1997: wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik  
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg in der Arbeitsgruppe  
"Theorie der kondensierten Materie II" von Prof. Dr. J. Richter

Magdeburg, den 08.02.2005