

EINFLUSS VON DIMENSIONALITÄT UND STRUKTUR AUF
DEN GRUNDZUSTAND UND DIE THERMODYNAMIK VON
QUANTENSPINSYSTEMEN

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 Dipl.-Phys. Reimar Schmidt
geb. am 14. März 1975 in Magdeburg

Gutachter: Prof. Dr. Johannes Richter
Prof. Dr. Dieter Ihle

eingereicht am: 24. Juni 2008
verteidigt am: 23. Januar 2009

DANKSAGUNG

Mein besonderer Dank gilt denen, die mich viel bei meiner Dissertation unterstützt haben.

An erster Stelle bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Johannes Richter, der diese Dissertation ermöglicht und betreut hat. Weiterhin danke ich den Mitgliedern Dipl.-Phys. Rachid Darradi, Dipl.-Phys. Ronald Zinke und ehemaligen Mitgliedern Dr. Jörg Schulenburg, Dr. Sven E. Krüger, Dr. Dirk Schmalfuß und Dr. Andreas Voigt der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Johannes Richter für die Hilfe, mit der sie mich beim Lösen physikalischer und technischer Probleme unterstützten. Ich möchte mich auch bei Herrn Prof. Dr. Jürgen Schnack für die Bereitstellung von Daten und Graphiken bedanken. Hilfreich waren ebenfalls Diskussionen mit Prof. Dr. Oleg Derzhko, Prof. Dr. Nedko Ivanov sowie Dipl.-Phys. Moritz Härtel.

Außerdem bedanke ich mich bei meiner Frau Maren, meinen Eltern, meiner Schwester und meinen Freunden, die immer wieder mein Selbstvertrauen stärkten.

Weiterer Dank gilt den nicht zu vergessenen Software-Autoren, die ein freies Betriebssystem und frei verfügbare Anwendungsprogramme geschaffen haben.

Natürlich ist hier die Liste der Personen, denen ich zu Dank verpflichtet bin, nicht zu Ende. Weil ich jedoch nicht jeden einzeln aufführen kann, bedanke ich mich an dieser Stelle ganz allgemein bei allen, die etwas zu dieser Dissertation beitrugen.

INHALTSVERZEICHNIS

| | |
|--|------------|
| Danksagung | iii |
| 1. Einführung | 1 |
| 1.1. Motivation | 1 |
| 1.2. Grundlagen | 3 |
| 2. Nulldimensionale Systeme | 7 |
| 2.1. Rotationsbänder | 10 |
| 2.2. Spektralkoeffizienten | 11 |
| 2.3. Unfrustrierte Systeme: Lieb-Mattis-System, Ring und Quadratgitter . . | 12 |
| 2.3.1. Spektren | 13 |
| 2.3.2. Spektralkoeffizienten | 15 |
| 2.3.3. Grundzustandsmagnetisierungen | 17 |
| 2.3.4. Integrierte Zustandsdichte | 19 |
| 2.3.5. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen | 24 |
| 2.3.6. Spezifische Wärmen | 28 |
| 2.4. Frustrierte Systeme: Das Oktaeder | 30 |
| 2.4.1. Spektren | 32 |
| 2.4.2. Grundzustandsmagnetisierungen | 33 |
| 2.4.3. Integrierte Zustandsdichte | 34 |
| 2.4.4. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen | 34 |
| 2.4.5. Spezifische Wärmen | 38 |
| 2.5. Frustrierte Systeme: Das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder | 39 |
| 2.5.1. Spektren | 40 |
| 2.5.2. Spektralkoeffizienten | 44 |
| 2.5.3. Grundzustandsmagnetisierungen | 46 |
| 2.5.4. Integrierte Zustandsdichte | 48 |
| 2.5.5. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen | 50 |
| 2.5.6. Spezifische Wärmen | 59 |
| 2.6. Magnetokalorischer Effekt | 61 |
| 3. Übergang von einer Dimension zu zwei Dimensionen | 65 |
| 3.1. Das XY-Modell | 65 |
| 3.1.1. Lineare Spinwellentheorie | 66 |
| 3.1.2. Extrapolation der Daten der exakten Diagonalisierung | 69 |

| | |
|---|------------|
| 4. Zweidimensionale Systeme: Das Bounce- und das Maple-Leaf-Gitter | 75 |
| 4.1. Das Bounce-Gitter | 76 |
| 4.1.1. Lineare Spinwellentheorie | 76 |
| 4.2. Das Maple-Leaf-Gitter | 83 |
| 4.3. Übergang vom Maple-Leaf-Gitter zum Bounce-Gitter | 85 |
| 4.3.1. Grundzustandsenergie | 87 |
| 4.3.2. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei $T = 0$ | 88 |
| 4.3.3. Untergittermagnetisierung bei $T = 0$ | 94 |
| 5. Ein dreidimensionales System: Das kubisch raumzentrierte Gitter | 97 |
| 5.1. Exakte Diagonalisierung | 98 |
| 5.1.1. Grundzustandsenergie | 99 |
| 5.1.2. Phasenbeziehungen im Grundzustand | 101 |
| 5.1.3. Untergittermagnetisierung bei $T = 0$ | 103 |
| 5.1.4. Singulett-Triplett-Anregungslücke | 104 |
| 5.2. Das unendlich ausgedehnte Gitter | 105 |
| 5.2.1. Extrapolation | 105 |
| 5.2.2. Lineare Spinwellentheorie | 106 |
| 6. Zusammenfassung | 113 |
| A. Koordinatentransformation | 117 |
| B. Octave-Programm | 119 |
| Literaturverzeichnis | 125 |

KAPITEL 1

EINFÜHRUNG

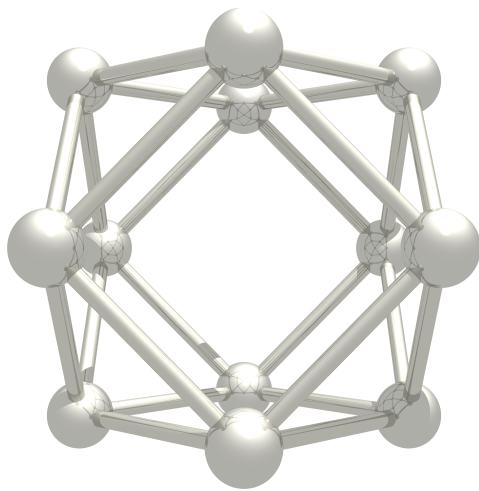
1.1. MOTIVATION

Ein wichtiger Meilenstein in der Beschreibung magnetischer Phänomene ist durch das Bohr-van-Leeuwen-Theorem [1] gegeben. Das Theorem sagt aus, dass Magnetismus ein rein quantenmechanisches Phänomen ist. 1928 führte Heisenberg [2] die zum Ferromagnetismus führenden Kräfte auf die Austauschwechselwirkung zurück. Formuliert man Austauschwechselwirkungen, welche wiederum auf Coulombwechselwirkungen und dem Pauliprinzip beruhen, mithilfe von Spinoperatoren, so erhält man das Heisenberg-Modell. Mit dem Heisenberg-Modell können Substanzen beschrieben werden, welche lokalisierte magnetische Momente (Spins) besitzen. Die Momente der isolierenden Festkörper stammen von Atomen (Ionen) mit un abgeschlossenen Schalen. Die Spins wechselwirken mit Momenten in ihrer Nachbarschaft. Oft sind in der unmittelbaren Umgebung der lokalisierten Momente auch diamagnetische Atome oder Gruppen von Atomen zu finden, die das Verhalten der magnetischen Bestandteile beeinflussen.

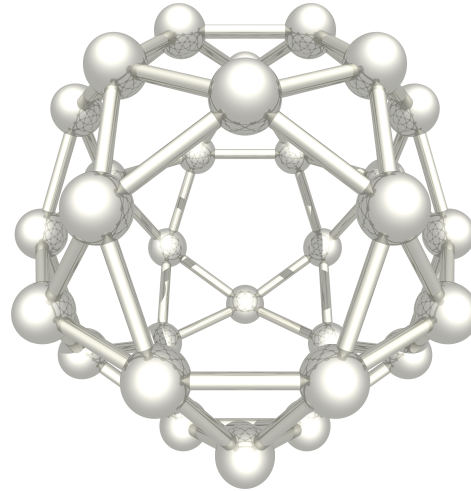
Gegenstand dieser Arbeit ist der Einfluss der Dimensionalität und der Struktur auf den Grundzustand und die Thermodynamik von Quantenspinsystemen. Als Quantenspinsysteme werden Systeme von miteinander wechselwirkenden Spins betrachtet, welche durch das Heisenberg-Modell und durch Variationen des Heisenberg-Modells mit niedriger Spinquantenzahl $s = 1/2, 1, 3/2, \dots$ beschrieben werden können. Im Grenzfall $s \rightarrow \infty$ ist der Einfluss der Quantenfluktuationen verschwunden, wohingegen für $s = 1/2$ der Einfluss der Quantenfluktuationen am stärksten ist. Mit der Spinquantenzahl s der Spins verändert sich demnach der Einfluss der Quantenfluktuationen.

Wichtige Größen, die die Eigenschaften der Modelle charakterisieren, sind Energiespektren, Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, Magnetisierungen, spezifische Wärmen und Suszeptibilitäten. Sie werden neben Dimensionalität und Struktur, z.B. auch durch die Stärke der Quantenfluktuationen, thermische Fluktuationen, Anisotropien und durch von außen angelegte Felder beeinflusst [3]. Die Dimensionalität und die Struktur haben wiederum Auswirkungen auf den Einfluss der Quantenfluktuationen, welche mit dem Heisenberg-Modell studiert werden können.

Strukturmerkmale sind z.B. die Anzahl der nächsten Nachbarn z_1 , die Anzahl von Nachbarn mit größeren Abständen, die geometrische Anordnung der Bindungen oder auch die Art und Stärke der Bindungen. Ein wichtiges Merkmal der Struktur, das die magnetischen Eigenschaften besonders beeinflusst, ist die Konkurrenz in den magnetischen Wechselwirkungen, die sogenannte Frustration. Existieren in den Systemen



(a) Das Kuboktaeder.



(b) Das Ikosidodekaeder.

Abbildung 1.1.: Die in Kapitel 2 „Nulldimensionale Systeme“ untersuchten Archimedischen Körper.

Anordnungen von wechselwirkenden Spins in einem Dreieck, so ist der antiferromagnetische Grundzustand frustriert. In diesem Fall konkurrieren die Wechselwirkungen, d.h. es können nicht alle Bindungen gleichzeitig befriedigt werden, so dass Frustration herrscht. Frustration kann zu interessanten Eigenschaften führen, da sie den Einfluss der Quantenfluktuationen verstärkt.

Der Einfluss der Quantenfluktuationen wird mit zunehmender Dimension geringer und ist deshalb in den nulldimensionalen Systemen am stärksten zu spüren. Zu den nulldimensionalen Systemen zählen die magnetischen Moleküle $\text{Cu}_{12}\text{La}_8$ [4], $\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ [5, 6] und $\text{Mo}_{72}\text{V}_{30}$ [7], deren Struktur in Abbildung 1.1 dargestellt ist. Die Frustration, die beim Kubokataeder $\text{Cu}_{12}\text{La}_8$ und bei den Ikosidodekaedern $\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ sowie $\text{Mo}_{72}\text{V}_{30}$ herrscht, führt z.B. im Vergleich mit unfrustrierten Ringen zu einem verstärkten magnetokalorischen Effekt [8].

Sind die Bindungen der nächsten und übernächsten Nachbarn relevant, so wird das Heisenberg-Modell als J_1 - J_2 -Modell bezeichnet. In einer Dimension können mit dem J_1 - J_2 -Modell z.B. LiCuVO_4 , Li_2CuO_2 und NaCu_2O_2 [9–11] gut beschrieben werden. Die frustrierte Diamant-Kette $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ [12–14] ist ebenso ein eindimensionales System, für welches das Heisenberg-Modell gute Resultate liefert.

In zwei Dimensionen sind $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$ und $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$ [15, 16] Beispiele für das J_1 - J_2 -Modell auf Quadratgittern. Das Dreiecksgitter Cs_2CuCl_4 [17], das Kagomé-Gitter $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ [18], das ausgedünnte J_1 - J_2 -Quadratgitter CaV_4O_9 [19] und das Shastry-Sutherland-Gitter $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [20–22] sind weitere zweidimensionale Gitter auf die das Heisenberg-Modell angewendet werden kann. Hochtemperatursupraleiter [23–25] und die Synthetisierung von neuen quasi-zweidimensionalen Materialien wie z.B. CaV_4O_9 oder $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ haben neue Forschungen auf dem Gebiet der magnetischen Materialien hervorgerufen. $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ weist wie auch CaV_4O_9 eine Singulett-Triplett-

Anregungslücke auf und besitzt analog zur ebenfalls quasi-zweidimensionalen Verbindung Cs_2CuBr_4 [26] eine besondere Plateau-Struktur im Magnetisierungsprozeß [27].

In drei Dimensionen ist das Pyrochlor-Gitter MgTi_2O_4 [28] ein Beispiel für eine frustrierte Verbindung mit antiferromagnetischen Austauschbindungen. Ebenso wie das Kagomé-Gitter besitzt es wahrscheinlich einen ungeordneten Grundzustand und demonstriert damit den starken Einfluss der Frustration hat.

Das Studium der Eigenschaften des Heisenberg-Modells in unterschiedlichen Dimensionen stimuliert natürlich auch die Erforschung des Modells beim Übergang von einer Dimension zu zwei Dimensionen sowie von zwei zu drei Dimensionen [29]. Oft sind in den Verbindungen neben den Bindungen in einer oder zwei Dimensionen noch Bindungen in die nächste Dimension vorhanden [30]. Ein Spinsystem mit einer Dimension zwischen eins und zwei, das Sierpinski-Gitter, wurde von Voigt in [31] untersucht.

Trotz vieler Studien ist das Heisenberg-Modell insbesondere im Hinblick auf das Zusammenspiel von Dimensionalität, Struktur und Quantenfluktuationen ein aktueller Forschungsgegenstand. Da das Heisenberg-Modell Vielteilchen-Systeme beschreibt, existieren nur wenige exakte Lösungen.

1.2. GRUNDLAGEN

Im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen die Eigenschaften des Hamilton-Operators

$$H = \sum_{i < j}^N J_{i,j} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - h \sum_i^N s_i^z . \quad (1.1)$$

Hier ist $J_{i,j}$ das Austauschintegral zwischen dem Spin \mathbf{s}_i und dem Spin \mathbf{s}_j . Da $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j$ den gleichen Beitrag liefert wie $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_i$, genügt es die Spinpaare $i < j$, anstatt alle Kombinationen i, j , zu betrachten. Bei $J_{i,j} > 0$ nimmt das Spinpaar $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j$ den antiferromagnetischen und bei $J_{i,j} < 0$ den ferromagnetischen Grundzustand ein. Die Spinoperatoren werden in Einheiten von \hbar angegeben. Mit N wird die Anzahl der Spins bezeichnet. Es gilt: $\mathbf{s}_i^2 |\psi\rangle = s(s+1) |\psi\rangle$ für jeden Spinoperator \mathbf{s}_i bei der Anwendung auf eine Spin-Wellenfunktion $|\psi\rangle$. Die Anzahl der Zustände, die die Systeme charakterisieren, ist durch $(2s+1)^N$ gegeben. Der Einfluss der Quantenfluktuationen auf die magnetischen Eigenschaften im Grundzustand und auf die Thermodynamik kann bei tiefen Temperaturen durch die Variation der Spinquantenzahl s untersucht werden. Allgemein gilt, dass mit zunehmendem s der Einfluss der Quantenfluktuationen kleiner wird. Das klassische Analogon von (1.1) entsteht für $s \rightarrow \infty$, indem man die Spinoperatoren durch Vektoren ersetzt.

Bemerkenswert ist, dass es z. B. in einer Dimension einen grundsätzlichen Unterschied zwischen halb- und ganzzahligem s gibt. Für eindimensionale Systeme konnte Haldane in [32] signifikante Unterschiede zwischen den Ketten mit halbzahligem und ganzzahligem Spinquantenzahl s nachweisen.

Die erste Summe des Hamilton-Operators (1.1) ist das Heisenberg-Modell und die

zweite Summe beschreibt die Wirkung eines von außen angelegten magnetischen Feldes¹ h in z -Richtung. Sie ist in der Literatur auch als Zeeman-Term bekannt. Das Heisenberg-Modell kann aus dem Hubbard-Modell [33] im Spezialfall halber Füllung bei großer Coulombabstoßung U abgeleitet werden. Es ist ein isotropes Modell, d.h. die drei Raumrichtungen sind im Spin-Raum gleichberechtigt.

Der Einfluss, den von außen angelegte Felder h ausüben, wird in Kapitel 2 (Nulldimensionale Systeme) untersucht.

Die Operatoren S^z und \mathbf{S}^2 , welche durch

$$S^z = \sum_i^N s_i^z \quad (1.2)$$

$$\mathbf{S}^2 = \left(\sum_i^N \mathbf{s}_i \right)^2 \quad (1.3)$$

definiert sind, vertauschen mit dem Hamilton-Operator (1.1). Mit M werden die Eigenwerte des Operators S^z bezeichnet. Die Eigenwerte des Operators \mathbf{S}^2 sind durch $S(S+1)$ gegeben.

Ist das Austauschintegral $J_{i,j} > 0$ und wechselwirken ausschließlich nächste Nachbarn miteinander, so bezeichnet man das aus Gleichung (1.1) bei $h = 0$ entstehende Modell auch als Heisenberg-Antiferromagnet. Die folgenden Resultate sind für den Heisenberg-Antiferromagneten bekannt. Eine exakte Lösung für die antiferromagnetische Kette wurde von Bethe [34] gefunden. In einer Dimension gibt es keine Fernordnung [35], d.h. Korrelationen von Spinpaaren verschwinden bei großen Abständen. Mit dem Mermin-Wagner-Theorem [36] wird die Situation in zwei Dimensionen beleuchtet: Fernordnung ist bei Temperaturen größer Null unmöglich. Bei $T = 0$ hängt es von der Struktur des Gitters ab, ob der Grundzustand ferngeordnet ist. Das Verschwinden der Fernordnung beim Übergang von zwei Dimensionen zu einer Dimension wird viel diskutiert [37–41].

In drei Dimensionen ist Fernordnung bei $T \geq 0$ möglich.

Die Schwächung der magnetischen Ordnung mit abnehmender Dimension kann beim Heisenberg-Antiferromagneten auf den stärker werdenden Einfluss der Quantenfluktuationen zurückgeführt werden. Quantenfluktuationen sind allerdings analog zu thermischen Fluktuationen auch in der Lage die Ordnung zu verstärken. In der Literatur werden solche Erscheinungen als „order-from-disorder“ Effekte bezeichnet [42, 43].

Da Grundzustandseigenschaften bei sehr kleinen Temperaturen noch messbar sein können, besteht die Möglichkeit die für $T = 0$ erhaltenen Ergebnisse mit experimentellen Daten zu vergleichen.

Der Einfluss der Quantenfluktuationen auf die magnetische Eigenschaften von Spin-

¹Das Feld h kann mit $g\mu_B B_z$ identifiziert werden, wobei g der Landé-Faktor, μ_B das Bohrsche Magneton und B_z das „reine“ magnetische Feld ist. Da g , μ_B und B_z in dieser Arbeit keine weitere Rolle spielen, wird nur der Parameter h zur Beschreibung des Feldes verwendet.

systemen ist interessant und deshalb das zentrale Thema dieser Arbeit. Auch wenn er mit zunehmender Dimensionalität abnimmt, wird er im Gegenzug durch Frustration verstärkt. Die Dimension der betrachteten Systeme erhöht sich mit jedem der folgenden Kapitel.

Für alle Spinsysteme, die in dieser Arbeit untersucht werden gilt, dass jeder Platz an dem ein Spin sitzt, einem beliebigen anderen Platz äquivalent ist.

Zur Berechnung ausgewählter Eigenschaften von (1.1) werden mittels der exakten Diagonalisierung zum einen das gesamte Spektrum und zum anderen, unter Verwendung der Lanczos-Technik [44–47], die niedrigsten Energien und die dazugehörigen Eigenzustände bestimmt. Beide Varianten der exakten Diagonalisierung wurden mit dem Programm spinpack [48] von Dr. Jörg Schulenburg durchgeführt.

Um mit einer weiteren Methode einen umfassenderen Gesamteindruck über die magnetischen Eigenschaften zu gewinnen wird in Kapitel 3, Kapitel 4 und Kapitel 5 neben der exakten Diagonalisierung noch die lineare Spinwellentheorie zur Berechnung der Grundzustandsenergie und der Magnetisierung bei $T = 0$ genutzt. Allerdings wird im Gegensatz zu Kapitel 2 nur der extreme Quantenfall mit $s = 1/2$ im Grundzustand betrachtet.

Neben diesen Methoden werden die Greensfunktionsmethode, die Coupled-Cluster-Methode, die Jordan-Wigner Transformation und die Quanten-Monte-Carlo-Methode häufig verwendet. Die verschiedenen Methoden ergänzen einander, weil jede Methode ihre Vor- und Nachteile hat.

Inspiziert durch Veröffentlichungen von Prof. Dr. Jürgen Schnack u.a. und die Synthetisierung von magnetischen Molekülen [49] werden als erstes in Kapitel 2 „Nulldimensionale Systeme“, das den Schwerpunkt dieser Arbeit bildet, die Eigenschaften von endlichen Systemen mit $N \leq 32$ untersucht. Dabei stehen die frustrierten Systeme, das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder, im Mittelpunkt. Zum Vergleich wird das frustrierte Oktaeder, ein Lieb-Mattis-System, ein unfrustrierter Ring und ein endliches Quadratgitter betrachtet.

Ist das Austauschintegral $J_{i,j}$ in Gleichung (1.1) ausschließlich für nächste Nachbarn verschieden von Null und gilt des Weiteren $J_{i,j} = J = 1$ so gelangt bei dem Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{i < j}^N \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - h \sum_i^N s_i^z \quad (1.4)$$

an, der in Kapitel 2 für unfrustrierte Systeme, einen frustrierten Platonischen und zwei frustrierte Archimedischen Körper studiert wird. Es werden Energien, Rotationsbänder, Spektralkoeffizienten und die Grundzustandsmagnetisierung ermittelt.

Für das Lieb-Mattis-System, den Ring, das Oktaeder und das Kuboktaeder lassen sich aufgrund der geringen Anzahl von wechselwirkenden Spins für die Spinquantenzahlen $s = 1/2, 1$ thermodynamische Eigenschaften, wie die integrierte Zustandsdichte, Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und die spezifische Wärme berechnen. In diesem

Kapitel wird ausschließlich die exakte Diagonalisierung als Methode verwendet. Der Einfluss der Quantenfluktuationen wird durch die Variation der Spinquantenzahl s studiert.

Das anschließende Kapitel 3 beschäftigt sich mit dem Übergang des unfrustrierten XY-Modells von einer zu zwei Dimensionen. Die hier gewonnenen Daten dienen zur Einschätzung der Jordan-Wigner-Transformation in [50]. Dabei wird der Übergang von Ketten zum Quadratgitter vollzogen. Die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung geben Auskunft über das Entstehen von magnetischer Ordnung.

Der Übergang zwischen zwei frustrierten zweidimensionalen Systemen, dem Bounce-Gitter und dem Maple-Leaf-Gitter, wird in Kapitel 4 anhand der Grundzustandsenergie, den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und der Untergittermagnetisierung bei $T = 0$ diskutiert. Die beim Bounce-Gitter eingeführten Bindungen, die das Maple-Leaf-Gitter entstehen lassen, bringen zusätzliche Frustration. Dieses Kapitel knüpft an die Veröffentlichung [51] an, in der Eigenschaften des Maple-Leaf-Gitters vorgestellt wurden.

Das in zwei Dimensionen viel untersuchte J_1 - J_2 -Modell auf dem Quadratgitter [52] hat die Erforschung des J_1 - J_2 -Modell auf dem kubisch raumzentrierten Gitter in Kapitel 5 stimuliert. In Kapitel 5 „Dreidimensionale Systeme“ wird Frustration über die übernächsten Nachbarn in das kubisch raumzentrierte Gitter eingebracht. Damit kann der Einfluss der dritten Dimension im Vergleich zum Quadratgitter studiert werden.

Anhang A und Anhang B beziehen sich auf die lineare Spinwellentheorie. In Anhang A wird die lokale Koordinatentransformation erläutert. Anhang B enthält ein Octave-Programm zur Berechnung der Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung bei $T = 0$.

NULLDIMENSIONALE SYSTEME

Das Interesse an den magnetischen Eigenschaften nulldimensionaler Systeme ist in den letzten Jahren stark gestiegen [49]. Bei kleinen Systemen sind exakte Aussagen möglich. Aus diesem Grund ist bei diesen Systemen der Einfluss von Frustration und Quantenfluktuationen gut zu studieren.

In dieser Arbeit stehen die existierenden stark frustrierten Moleküle $\text{Cu}_{12}\text{La}_8$, $\text{Mo}_{72}\text{V}_{30}$ und $\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ im Mittelpunkt. In der Verbindung $\text{Cu}_{12}\text{La}_8$ sind zwölf Kupfer-Atome, die als Kuboktaeder angeordnet sind, von einem Würfel bestehend aus Lanthan-Atomen umgeben. Bedeutend bekannter ist die Synthetisierung des Ikosidodekaeders $\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ [5, 6]. Bei diesem Molekül sitzen dreißig Fe^{3+} Ionen, auf den Ecken und wechselwirken mit ihren nächsten Nachbarn über ein antiferromagnetisches Austauschintegral. Für Fe^{3+} ist die Spinquantenzahl $s = \frac{5}{2}$. Das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder zählen zu den Archimedischen Körpern.

Neben den Archimedischen Körpern sind ebenfalls die Platonischen Körper besondere nulldimensionale Systeme. Die fünf Platonischen und die dreizehn Archimedischen Körper besitzen die Eigenschaft, dass jeder Eckpunkt einem beliebigen anderen Eckpunkt gleichwertig ist.

Das Oktaeder ist ein stark frustrierter Platonischer Körper mit der Koordinationszahl $z_1 = 4$. Diese Koordinationszahl ist auch die Koordinationszahl des Kuboktaeders und des Ikosidodekaeders. Im Gegensatz zu den beiden letztgenannten Systemen kann das Spektrum des Oktaeders für alle Quantenzahlen s exakt angegeben werden. Es eignet sich demnach für den Vergleich mit dem Kuboktaeder und dem Ikosidodekaeder und ist deshalb ebenfalls Gegenstand dieses Kapitels. Das kleine Rhombenkuboktaeder besitzt auch die Koordinationszahl $z_1 = 4$, ist jedoch aufgrund der achtzehn Quadrate weniger frustriert als das Kuboktaeder mit sechs Quadraten. Der Einfluss von Frustration wird durch den Vergleich mit einem unfrustrierten Lieb-Mattis-System, einer Kette mit zwölf Spins sowie einem Quadratgitter mit 32 Spins untersucht. In einem Lieb-Mattis-System koppelt jeder Spin ausschließlich an alle Spins, die den anderen Untergittern angehören. Wirft man einen Blick auf Abbildung 2.1, so wird die Definition der Lieb-Mattis-Systeme sofort klar. Die Anzahl der Untergitter kann, wie beim Oktaeder, auch größer sein als bei dem in Abbildung 2.1 dargestellten Heisenbergquadrat.

Die Platonischen Körper [53], deren älteste überlieferte Beschreibung man in [54] findet, haben im Gegensatz zu den Archimedischen Körpern nur kongruente reguläre Vielecke (Polygone) als Begrenzungsflächen, wohingegen man bei den Archimedischen

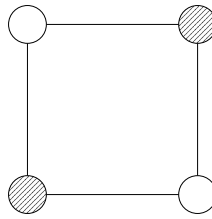


Abbildung 2.1.: Das Heisenbergquadrat. Die weißen und die schraffierten Kreise symbolisieren Spins, die zu zwei verschiedenen Untergittern gehören. Die Bindungen zwischen den Spins sind durch Linien gekennzeichnet.

Tabelle 2.1.: Eigenschaften der fünf Platonischen Körper. Angegeben werden die Anzahl und Form der Begrenzungsflächen, die Anzahl der Kanten (Bindungen) N_B sowie die Anzahl der Eckpunkte (Spins) N .

| Bezeichnung des Körpers | Anzahl und Form der Begrenzungsflächen | N_B | N |
|-------------------------|--|-----------|----------|
| Tetraeder | 4 Dreiecke | 6 | 4 |
| Würfel | 6 Quadrate | 12 | 8 |
| Oktaeder | 8 Dreiecke | 12 | 6 |
| Dodekaeder | 12 Fünfecke | 30 | 20 |
| Ikosaeder | 20 Dreiecke | 30 | 12 |

Körpern unterschiedliche reguläre Polygone auf ihren Begrenzungsflächen findet. In Tabelle 2.1 sind die Platonischen Körper [53] mit ihren Begrenzungsflächen, der Anzahl der Bindungen und der Anzahl der Spins angegeben. Analog dazu werden in Tabelle 2.2 die entsprechenden Eigenschaften der Archimedischen Körper [55, 56] aufgeführt. Die fett und schräg gedruckten Körper sind die in diesem Kapitel untersuchten Systeme.

Die exakte Diagonalisierung eignet sich zum Studium der Eigenschaften des Hamilton-Operators (1.4). Eine vollständige Diagonalisierung konnte bei $N = 12$ bis zur Quantenzahl $s = 1$ durchgeführt werden. $3^{12} = 531441$ Zustände charakterisieren in diesem Fall die Spinsysteme. Mit Hilfe der Lanczos-Technik wurden für die Quantenzahl $s = \frac{1}{2}$ bis zu $N = 32$ Spins berücksichtigt. Für $s > \frac{1}{2}$ können mit dieser Technik bei $N \geq 30$ nur noch die niedrigsten Energien und die dazugehörigen Eigenvektoren in Räumen mit großem M berechnet werden. Für das Kuboktaeder wurden die niedrigsten Energien und die dazugehörigen Eigenwerte bis zur Quantenzahl von $s = \frac{7}{2}$ bestimmt.

Erwartungswerte eines Operators O werden mit $\langle O \rangle$ bezeichnet. Sie berechnen sich nach

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_n^{(2s+1)^N} O_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)}{Z}, \quad (2.1)$$

Tabelle 2.2.: Eigenschaften der dreizehn Archimedischen Körper. Angegeben werden die Anzahl und Form der Begrenzungsflächen, die Anzahl der Kanten (Bindungen) N_B sowie die Anzahl der Eckpunkte (Spins) N . Bei der mathematischen Notation werden die an einen Eckpunkt (Spin) angrenzenden Flächen und deren Anzahl angegeben (z.B. entspricht $3,4^3$ einem Dreieck und drei Vierecken).

| Bezeichnung des Körpers | Notation | N_B | N |
|---|------------------------------------|------------------|------------------|
| Abgeschrägtes Hexaeder | $3^4,4$ | 36 | 24 |
| <i>Kuboktaeder</i> | <i>$3,4,3,4$</i> | <i>24</i> | <i>12</i> |
| (kleines) Rhombenkuboktaeder | $3,4^3$ | 48 | 24 |
| Abgeschrägtes Dodekaeder | $3^4,5$ | 150 | 60 |
| (kleines) Rhombenikositodekaeder | $3,4,5,4$ | 120 | 60 |
| <i>Ikositodekaeder</i> | <i>$3,5,3,5$</i> | <i>60</i> | <i>30</i> |
| Abgestumpftes Tetraeder | $3,6^2$ | 90 | 60 |
| Abgestumpftes Hexaeder | $3,8^2$ | 36 | 24 |
| Abgestumpftes Dodekaeder | $3,10^2$ | 90 | 60 |
| Abgestumpftes Oktaeder | $4,6^2$ | 36 | 24 |
| Abgestumpftes Kuboktaeder oder großes Rhombenkuboktaeder | $4,6,8$ | 72 | 48 |
| Abgestumpftes Ikositodekaeder oder großes Rhombenikositodekaeder | $4,6,10$ | 180 | 120 |
| Abgestumpftes Ikosaeder (Fußballkörper) | $5,6^2$ | 90 | 60 |

wobei

$$Z = \sum_n^{(2s+1)^N} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) \quad (2.2)$$

die kanonische Zustandssumme ist. Dabei ist die Boltzmannkonstante mit $k_B = 1$ und die Temperatur mit T zu identifizieren. Die Energien E_n erfüllen die Eigenwertgleichung

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle . \quad (2.3)$$

Unter Verwendung des vollständigen Satzes der Eigenfunktionen

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbf{1} \quad (2.4)$$

des Hamilton-Operators können die Erwartungswerte O_n eines mit H vertauschenden Operators O aus

$$\langle\psi_n|O|\psi_n\rangle = O_n \quad (2.5)$$

bestimmt werden.

2.1. ROTATIONSBÄNDER

Da mit der exakten Diagonalisierung nur relativ kleine Systeme vollständig diagonalisiert werden können, sollen nun Näherungen betrachtet werden, mithilfe derer auch ohne die Kenntnis des gesamten Spektrums thermodynamische Eigenschaften größerer Systeme, wie dem Ikosidodekaeder, berechnet werden können. In [57] wurde die für Ringe mit geradem N bereits getesteten Rotationsbänder für Polytope wie das Oktaeder und das Ikosidodekaeder verwendet. Mit Rotationsbändern wird eine Abhängigkeit der niedrigsten Energien der S -Räume von $S(S+1)$ bezeichnet. Die niedrigsten Energien folgen der Landé Intervall Regel [58–61]. Die Elemente der S -Räume sind durch die Eigenwerte $S(S+1)$ des Operators \mathbf{S}^2 festgelegt. Die niedrigsten Energien der S -Räume sind mit den niedrigsten Energien der M -Räume identisch¹. Der Abhängigkeit der niedrigsten Energien der S -Räume von $S(S+1)$, liegt eine Untergitterstruktur zugrunde [57, 62–64].

Das Rotationsband verdankt seinen Namen der Ähnlichkeit der niedrigsten Energien zum Spektrum des Starren Rotors.

Die niedrigsten Energien $E_{S,\min}$ sind durch

$$E_{S,\min} \approx E_G + J \frac{D(N, s)}{N} S(S+1) \quad (2.6)$$

gegeben. E_G und $D(N, s)$ können über die Bedingung bestimmt werden, dass im Grenzfall $S = 0$ der Grundzustand sowie bei maximalem S die Energie des ferromagnetischen Systems angenommen werden. Schnack und Luban [57] vermuteten, dass die Energien durch

$$E_{S,\min}^{\text{approx}} = J \frac{D}{N} [S(S+1) - N_{\text{UG}} S_{\text{UG}} (S_{\text{UG}} + 1)] , \quad (2.7)$$

approximiert werden können, falls das Spinsystem in N_{UG} Untergitter (UG) zerfällt. $S_{\text{UG}} = N_S/N_{\text{UG}}$ ist hier der größtmögliche Spin, den ein Untergitter annehmen kann. Den Koeffizienten D erhält man durch das Anpassen an die exakt bekannte ferromagnetische Energie. Er ist somit durch

$$D = \frac{N_B}{N(1 - 1/N_{\text{UG}})} \quad (2.8)$$

definiert, wobei N_B die Anzahl der Bindungen ist. Zum Vergleich von (2.6) und (2.7)

¹Dieses Wissen ist bei der Verwendung des Programms spinpack hilfreich, da hier die M -Räume vorgegeben werden, welche zu diagonalisieren sind.

werden die Abweichungen

$$\Delta_{S,\min} = \sum_S [(E_N(S, s) - E_{S,\min}) / (E_{\text{FM}})]^2 \quad (2.9)$$

und

$$\Delta_{S,\min}^{\text{approx}} = \sum_S [(E_N(S, s) - E_{S,\min}^{\text{approx}}) / (E_{\text{FM}})]^2 \quad (2.10)$$

berechnet. $E_N(S, s)$ sind die niedrigsten Energien der S -Räume und E_{FM} die Energien des ferromagnetischen Grundzustandes. Die Rotationsbänder $E_{S,\min}$ und $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ können verwendet werden, um z.B. bei niedrigen Temperaturen die Suszeptibilität von Systemen zu berechnen, die nicht vollständig diagonalisierbar sind.

2.2. SPEKTRALKOEFFIZIENTEN

Zur Analyse der Abweichungen der niedrigsten Energien von den Rotationsbändern sind die von Engelhardt und Luban in [65] eingeführten Spektralkoeffizienten geeignet. Ein von außen angelegtes Feld hebt die $(2S+1)$ -fache Entartung (Kramers-Entartung) von Feld-freien Multipletts auf [65]. Startet man mit der Erhöhung des Feldes von $h = 0$, so wechselt der Grundzustand eines endlichen Antiferromagneten von $S = M = 0$ mit einer Schrittweite von eins nach $S = M = Ns$. Jede der Ns Veränderungen der Grundzustands-Quantenzahlen ist mit einer Kreuzung von Energieniveaus verbunden. Das Feld, bei dem sich die Grundzustands-Quantenzahlen zum n -ten mal ändern, wird mit h_n benannt. Bestimmbar sind die Felder h_n , bei denen sich Energieniveaus kreuzen, aus der Gleichung

$$E_N(S, s) = E_N(S - 1, s) + h_n \quad (2.11)$$

für $S = n$, wobei gilt $n = 1, \dots, Ns$. Mit $E_N(S, s)$ und $E_N(S - 1, s)$ werden die niedrigsten Energien des S -Raumes und des $S - 1$ -Raumes bezeichnet. Nutzt man die Spektralkoeffizienten

$$c_n = \frac{Nh_n}{n} \quad (n = 1, \dots, Ns) \quad (2.12)$$

zur Darstellung der niedrigsten Energien der S -Räume, so findet man die Formulierung [65]

$$E_N(S, s) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^S nc_n(N, s) + E_G \quad (1 \leq S \leq Ns) . \quad (2.13)$$

Hier ist $E_G \equiv E(0, s)$ die Grundzustandsenergie. An dieser Stelle sei noch bemerkt, dass sich Gleichung (2.13), bei von n unabhängigen Spektralkoeffizienten $c(S, s)$, zu

$$E_N(S, s) = \frac{c(N, s)S(S+1)}{2N} + E_G \quad (0 \leq S \leq Ns) \quad (2.14)$$

vereinfacht, was im wesentlichen mit den im vorherigen Abschnitt vorgestellten Rotationsbändern übereinstimmt.

Für Lieb-Mattis-Systeme kann gezeigt werden, dass $c_n(N, s)$ konstant ist, der Wert hängt vom System ab. Im Fall des Rings mit $N = 4$, dem Heisenbergquadrat, sind die Spektralkoeffizienten $c_n(N, s) = 4$.

Wie schon in [65] für Ringe mit geradem N gezeigt wurde, variieren die Spektralkoeffizienten i.a. relativ stark mit n . Die Variation der $c_n(N, s)$ mit n kann als Maß für die Abweichungen der niedrigsten Energien von den Rotationsbändern gedeutet werden.

Die Singulett-Triplett-Lücke, wie die Lücke zwischen dem niedrigsten Singulett und dem niedrigsten Triplett in dieser Arbeit bezeichnet wird, steht in folgendem Zusammenhang mit dem ersten Spektralkoeffizienten

$$\Delta_{\text{ST}}(N) = E_N(1, s) - E_N(0, s) = c_1(N, s)J/N. \quad (2.15)$$

2.3. UNFRUSTRIERTE SYSTEME: LIEB-MATTIS-SYSTEM, RING UND QUADRATGITTER

In diesem Abschnitt werden zum Vergleich mit den später behandelten frustrierten Systemen magnetische Eigenschaften von drei unfrustrierten Systemen vorgestellt. Die unfrustrierten Systeme sind ein Lieb-Mattis-System, der Ring mit zwölf Spins und das Quadratgitter mit $N = 32$ Spins. In Abbildung 2.2 ist eine dreidimensionale Darstellung des Rings mit zwölf Spins zu finden, der die Nummerierung der Plätze entnommen werden kann. Das Quadratgitter mit $N = 32$ Spins ist in Abbildung 2.3 zu sehen. Alle Ringe mit einer geraden Anzahl von Plätzen sind unfrustriert und bipartit. Bipartite Systeme sind unfrustrierte Systeme, die in zwei Untergitter A und B zerfallen, wobei jeder Spin aus A nur mit Spins aus B wechselwirkt. Die Anzahl der mit den Spins wechselwirkenden Spins des anderen Untergitter hängt vom System ab. Bei Ringen ist sie zwei und beim Quadratgitter vier. Wie in Abschnitt 2.1 und 2.2 schon diskutiert wurde, besteht ein ziemlich großes Interesse an der Physik, die Ringe zeigen [66]. Aufgrund der gleichen Anzahl der Plätze N besitzen das Lieb-Mattis-System und der Ring mit zwölf Spins $2^{12} = 4096$ Zustände im Fall von $s = \frac{1}{2}$ und $3^{12} = 531441$ Zustände bei der Quantenzahl $s = 1$, wie auch das Kuboktaeder. Allerdings besitzt das Lieb-Mattis-System sechs nächste Nachbarn ($z_1 = 6$) und der Ring zwei nächste Nachbarn ($z_1 = 2$). Der Einfluss der Quantenfluktuationen ist demnach beim Ring stärker als beim Lieb-Mattis-System. Das Quadratgitter, das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder besitzen vier nächste Nachbarn ($z_1 = 4$). Der Vergleich von Eigen-

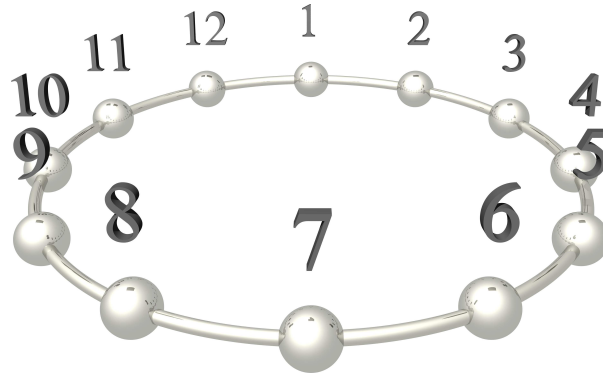


Abbildung 2.2.: Eine dreidimensionale Darstellung des Rings mit zwölf Spins. Die Kugeln symbolisieren die Punkte, an denen Spins sitzen, und die Zylinder die Bindungen. Mit den Zahlen werden die Spins nummeriert.

schaften unfrustrierter Systeme mit frustrierten Systemen ermöglicht es, den Einfluss der Quantenfluktuationen von dem der Frustration zu unterscheiden. Die 2^{32} Zustände, die den gesamten Hilbertraum des Quadratgitters mit $N = 32$ aufspannen, machen die vollständige Diagonalisierung dieses Quadratgitters zu aufwendig.

2.3.1. Spektren

In Abbildung 2.4 sind die Energie-Spektren des Lieb-Mattis-Systems (LMS) mit $N = 12$ für $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ in Abhängigkeit von S abgebildet. Die Energien dieses Lieb-Mattis-Systems lassen sich bei Abwesenheit eines äußeren Feldes aus

$$E = \frac{1}{2}J(\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_A^2 - \mathbf{S}_B^2) \quad (2.16)$$

berechnen, wobei gilt

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_A^2 + \mathbf{S}_B^2 + 2\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B \quad (2.17)$$

$$\mathbf{S}_A = \sum_{i \in A} \mathbf{s}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{S}_B = \sum_{j \in B} \mathbf{s}_j \quad (2.18)$$

$$S = |S_A - S_B|, |S_A - S_B| + 1, \dots, S_A + S_B. \quad (2.19)$$

Die Quantenzahlen S_A und S_B nehmen die ganzzahligen Werte von null bis $Ns/2$ an.

Da bei Lieb-Mattis-Systemen $E_{S,\min} = E_{S,\min}^{\text{approx}}$ gilt, ist nur eine Kurve zu finden. Ebenfalls charakteristisch für Lieb-Mattis-Systeme ist, dass die niedrigsten Energien exakt durch das Rotationsband beschrieben werden. Die erste Anregung des Spektrums ist die niedrigste Triplettenenergie. Sicherlich können auch die ersten Anregungen eines jeden S -Raumes durch weitere Rotationsbänder beschrieben werden, da sie klar und

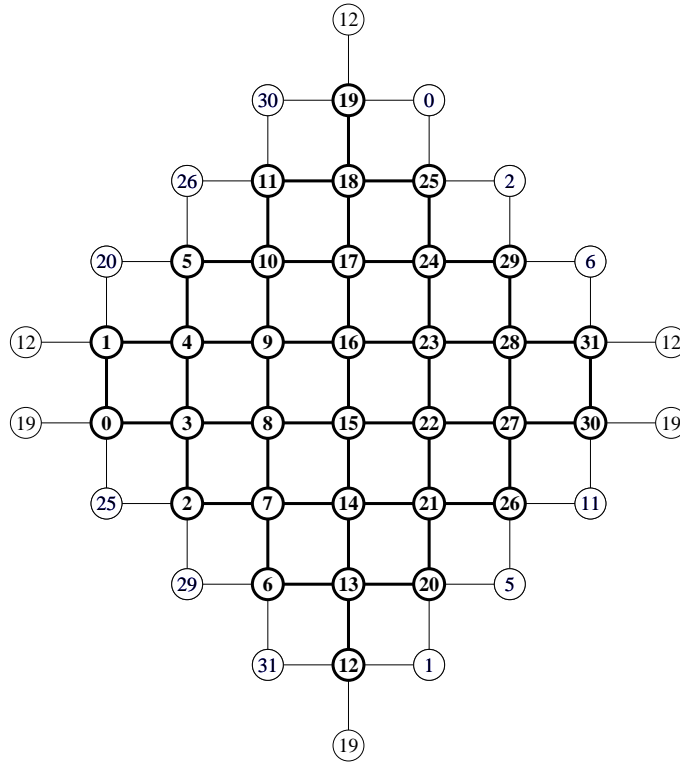


Abbildung 2.3.: Das quadratische Gitter mit $N = 32$ Spins. Bindungen und Plätze innerhalb des Gitters sind mit dicken Linien dargestellt. Mit dünnen Bindungen und Plätzen werden die periodischen Randbedingungen symbolisiert. Die Spins sind von Null beginnend nummeriert.

regelmäßig voneinander separiert sind. Es gibt im Fall von $s = \frac{1}{2}$ zwei Triplets und eine Energie mit $S = 2$ sowie im Fall von $s = 1$ zwei Triplets, zwei Energien mit $S = 2$, eine Energie mit $S = 3$ und eine Energie mit $S = 4$, die niedriger sind als die erste Singulett-Anregung. Die höchsten Singulett- und Triplet-Anregungen besitzen die Energie $E = 0$. Das Verhältnis $(E_{\text{FM}} - \max\{E(S = 0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}})$ bei dem E_{FM} die Energie des ferromagnetischen, E_{G} die des antiferromagnetischen Zustands und $\max\{E(S = 0)\}$ das höchste Singulett ist, kann als Maß für die Stauchung der Rotationsbänder der höchsten Energien angesehen werden. Im extremen Quantenfall ist $(E_{\text{FM}} - \max\{E(S = 0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}}) = 0.42$ und 0.46 für $s = 1$. Dementsprechend nimmt die Stauchung der höchsten Energien mit geringer werdendem Einfluss der Quantenfluktuationen ab.

Das Energie-Spektrum des Rings mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ und die niedrigsten Energien des Quadratgitters mit $s = \frac{1}{2}$ sowie die Rotationsbänder $E_{S,\min}$ (Gleichung (2.6)) und $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.7)) sind in Abbildung 2.5 in Abhängigkeit von S zu sehen. Die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ (Gleichung (2.9)) und $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.10)) sind, gemeinsam mit den Abweichungen der im Folgenden behandelten frustrierten Systeme, in Tabelle 2.9 aufgeführt. Mit abnehmenden Quantenfluktuationen nehmen auch die

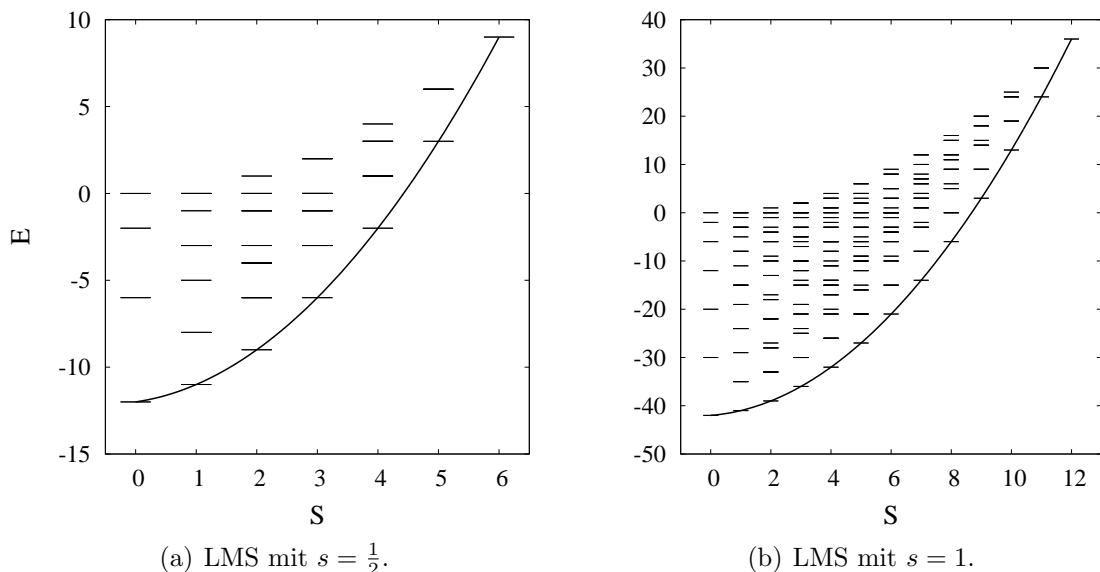


Abbildung 2.4.: Spektren des Lieb-Mattis-Systems (LMS) mit $N = 12$ für (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von S bei $h = 0$. Die Kurve $E_{S,\min} = E_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichungen (2.6), (2.7)) beschreibt exakt die niedrigsten Energien eines jeden S -Unterraumes.

Abweichungen ab, wobei die Verringerung beim Übergang vom extremen Quantenfall zu $s = 1$ am größten ist.

Aus der Abbildung 2.5 ist ersichtlich, dass bei dem unfrustrierten Ring die erste Anregung das erste Triplett ist. Die niedrigsten Energien eines jeden S -Raums sind deutlich von den ersten Anregungen separiert. Wie auch die Quotienten

$$(E_{\text{FM}} - \max\{E(S = 0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}})$$

des Lieb-Mattis-Systems sind $(E_{\text{FM}} - E_{S=0,\text{Max}}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}}) = 0.04$ für $s = \frac{1}{2}$ und 0.05 für $s = 1$ in Tabelle 2.9 (Abschnitt 2.5) zum Vergleich mit den anderen nulldimensionalen Systemen angegeben.

2.3.2. Spektralkoeffizienten

Bei Lieb-Mattis-Systemen sind die Spektralkoeffizienten, unabhängig von der Quantenzahl s , gleich der Anzahl der Spins, d.h. $c_n(N, s) = N$. Es gibt keine Abweichungen von diesem Wert, was auch die Rotationsbänder dokumentieren, die exakt die niedrigsten Energien der S -Räume beschreiben. Für den Ring und das Quadratgitter ist mit zunehmendem n ein Abfall der Koeffizienten zu beobachten. Eine Ausnahme von diesem Verhalten findet man im extremen Quantenfall beim Ring. Hier vergrößert sich der Spektralkoeffizient zunächst, um danach kontinuierlich kleiner zu werden. Die Spektralkoeffizienten des Rings sind für $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ in Abbildung 2.6 (a) und für die

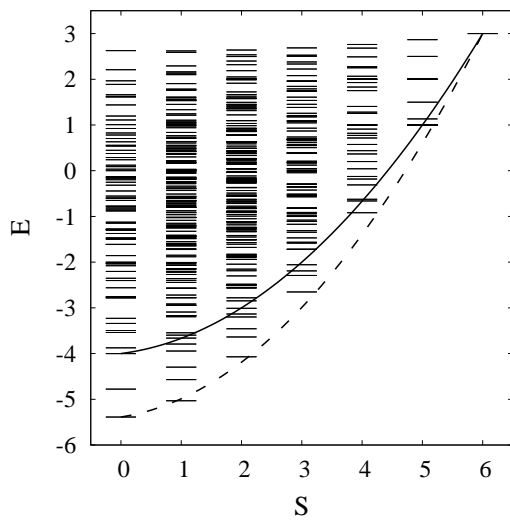
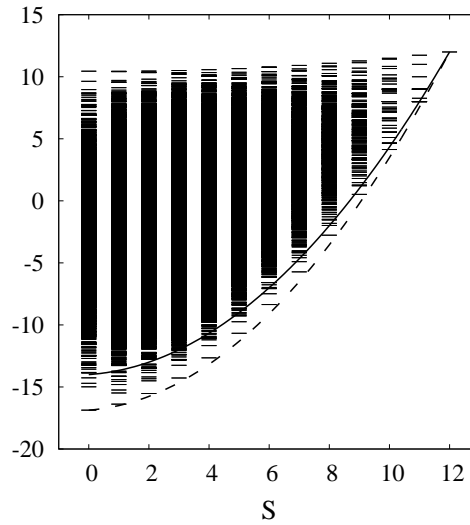
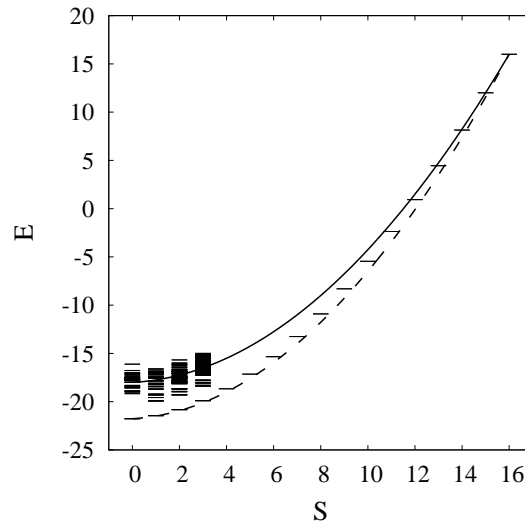
(a) Ring mit $s = \frac{1}{2}$.(b) Ring mit $s = 1$.(c) Quadratgitter mit $s = \frac{1}{2}$.

Abbildung 2.5.: Spektren des Rings mit $N = 12$ für (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ sowie die niedrigsten Energien des Quadratgitters mit $N = 32$ in (c) für $s = \frac{1}{2}$ in Abhängigkeit von S bei $h = 0$. Die Ergebnisse von $E_{S,\min}$ (Gleichung (2.6)) sind durch eine gestrichelt und die Ergebnisse von $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.7)) durch eine durchgezogene Linie angegeben.

ganzen Quantenzahlen $s = 1, 2, 3$ in (b) zu sehen. In Abbildung 2.6 (a) sind außerdem die Koeffizienten des Quadratgitters mit $s = \frac{1}{2}$ dargestellt. Für die Darstellung der Spektralkoeffizienten des Ringes und des Quadratgitters in einem Diagramm wurden die Spektralkoeffizienten durch $2z_1$ dividiert, wobei z_1 die Anzahl der nächsten Nachbarn ist. Damit ist beim Ring und beim Quadratgittern $c_n(N, s)/(2z_1) = 1$ für

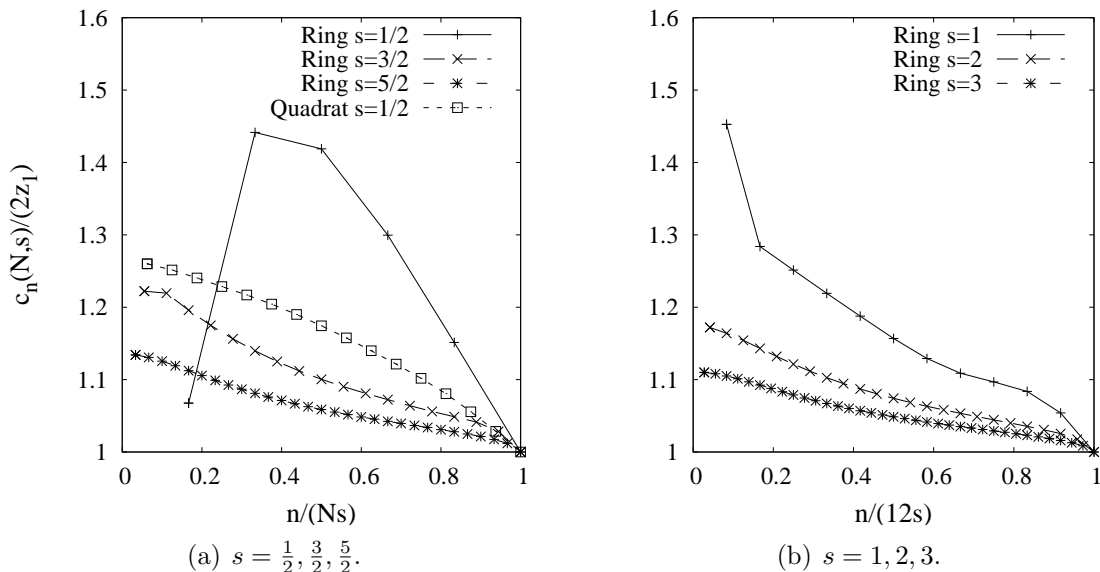


Abbildung 2.6.: Spektralkoeffizienten $c_n(N, s)/(2z_1)$ in (a) für die halbzahligen Quantenzahlen des Rings mit $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ sowie des Quadratgitters mit $s = \frac{1}{2}$ und in (b) für die ganzzahligen Quantenzahlen s des Rings mit $s = 1, 2, 3$ in Abhängigkeit von $n/(Ns)$. Die Linien sind nur eine Verbindung der Datenpunkte.

$n/(Ns) = 1$. Die Linien in diesen Darstellungen sind nur eine Verbindung der Werte. Bis zur Quantenzahl $s = \frac{5}{2}$ wurden die Spektralkoeffizienten des Ringes schon in [65] vorgestellt. Zur Berechnung der Energien verwendeten die Autoren die quasi-exakte Quanten-Monte-Carlo Methode. Wird der Einfluss der Quantenfluktuationen kleiner, nähern sich die Spektralkoeffizienten $c_n(12, s)$ dem Wert vier im Fall des Rings und dem Wert acht im Fall des Quadratgitters an. Ein Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Quantenzahlen wird bei starken Quantenfluktuationen deutlich. Im Gegensatz zu $s = \frac{1}{2}$ ist bei $s = 1$ der Spektralkoeffizient $c_1(12, 1)$ des Rings kleiner als $c_2(12, 1)$.

2.3.3. Grundzustandsmagnetisierungen

Die Grundzustandsmagnetisierungen

$$m(h) = \frac{\langle \psi_G | S^z | \psi_G \rangle}{Ns} \quad (2.20)$$

des Lieb-Mattis-Systems mit $s = \frac{1}{2}, 1$, des Rings mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{2}$ und des Quadratgitters mit $s = \frac{1}{2}$ werden in Abbildung 2.7 dargestellt. Mit $|\psi_G\rangle$ werden in (2.20) die Grundzustands-Vektoren für das jeweilige Feld benannt. Wie schon in Abschnitt 2.2 erwähnt wurde, können die Feldstärken an den Sprungstellen der Magnetisierung

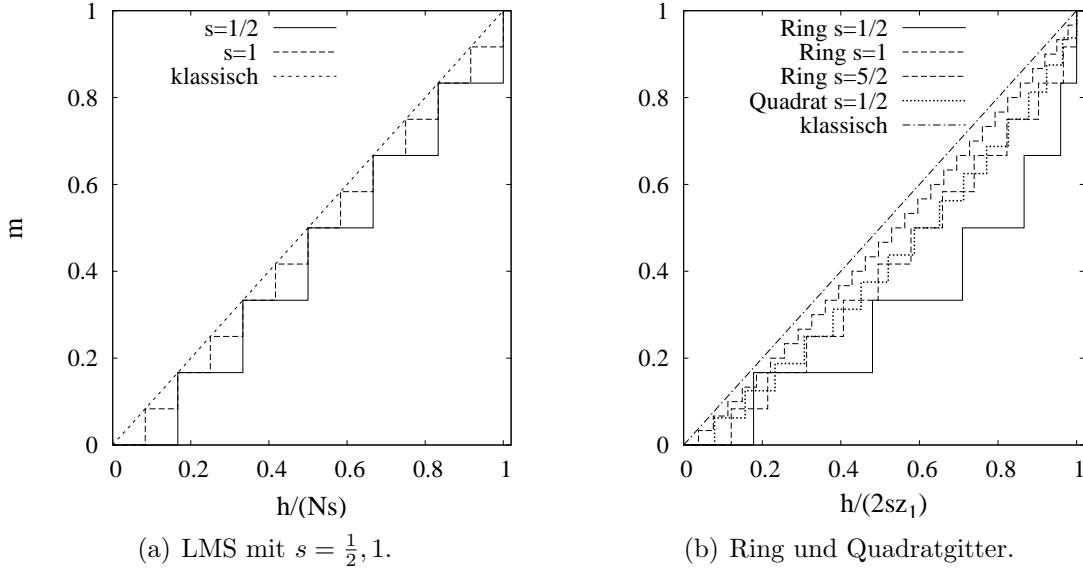


Abbildung 2.7.: Grundzustandsmagnetisierungen $m(h)$ in (a) für das Lieb-Mattis-Systems mit $s = \frac{1}{2}, 1$ in Abhängigkeit von $h/(Ns)$ und in (b) für den Ring mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{2}$ sowie das Quadratgitter mit $s = \frac{1}{2}$ in Abhängigkeit von $h/(2sz_1)$. Die Geraden in beiden Darstellungen sind die klassischen Magnetisierungen bei $T = 0$.

aus Gleichung (2.11) berechnet werden. Ab der Sättigungsfeldstärke h_s ist die Magnetisierung $m(h \geq h_s) = Ns$. Bei Lieb-Mattis-Modellen ist die Anzahl der Sprünge $n = Ns$ und alle Magnetisierungs-Sprünge besitzen die gleiche Höhe. Unabhängig von der Quantenzahl s findet man äquidistante Plateaus, wobei sich die Anzahl der Sprünge mit s erhöht. Im Unterschied zum Lieb-Mattis-System ist die Größe der Plateaus beim Ring und beim Quadratgitter nicht konstant. Es ist beim Ring mit $s = \frac{1}{2}$ gut zu erkennen, dass die Größe der Plateaus ab dem ersten Sprung kleiner wird. Im Fall von $s = \frac{5}{2}$ nimmt die Größe der Plateaus kontinuierlich ab. Bei $s = 1$ schwankt die Größe der Plateaus. Es kann dennoch der Trend zu kleiner werdenden Plateaus mit steigender Feldstärke abgelesen werden. Analog zum Ring gibt es beim Quadratgitter keine Plateaus von herausragender Größe oder Sprünge unterschiedlicher Höhe. Es ist ebenfalls die Tendenz zu kleiner werdenden Plateaus mit größer werdendem Feld zu erkennen. Tabelle 2.4 und Tabelle 2.3 können die Werte der Felder h_n entnommen werden, bei denen die Magnetisierungen springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen (bis zur vierten Stelle nach dem Komma). Die klassische Magnetisierung bei $T = 0$ ist die Gerade zur Sättigungs-Magnetisierung, die in Abbildung 2.7 (a) und (b) dargestellt ist. Wie man dieser Abbildung entnehmen kann, sind die quantenmechanischen Magnetisierungen des Lieb-Mattis-Systems an den Sprungstellen h_n gleich der klassischen Magnetisierung. Die quantenmechanischen Magnetisierungen des Rings und des Quadratgitters sind hingegen, außer im Fall der Sättigung bei h_s , immer kleiner als die klassische Magnetisierung. Die Abweichungen von der klassischen Magnetisierung

Tabelle 2.3.: Werte der Feldstärke h_n , an denen die Magnetisierungen $m(h_n)$ des Lieb-Mattis-Systems mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}, 1$ springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen.

| h_n | $m(h_n)$ des LMS für $s =$ | |
|-------|----------------------------|--------|
| | $\frac{1}{2}$ | 1 |
| 1 | 0.1667 | 0.0833 |
| 2 | 0.3333 | 0.1667 |
| 3 | 0.5000 | 0.2500 |
| 4 | 0.6667 | 0.3333 |
| 5 | 0.8333 | 0.4167 |
| 6 | 1.0000 | 0.5000 |
| 7 | | 0.5833 |
| 8 | | 0.6667 |
| 9 | | 0.7500 |
| 10 | | 0.8333 |
| 11 | | 0.9167 |
| 12 | | 1.0000 |

werden mit zunehmender Quantenzahl kleiner und können somit dem Einfluss der Quantenfluktuationen zugeschrieben werden.

2.3.4. Integrierte Zustandsdichte

Da die niedrigsten Energien das Tieftemperatur-Verhalten der spezifischen Wärme stark beeinflussen, wird in diesem Abschnitt für $N = 12$ das Lieb-Mattis-System und der Ring mit $s = \frac{1}{2}, 1$ in Bezug auf die Lage und Entartung der niedrigsten Energien diskutiert. Dazu wird die integrierte Zustandsdichte

$$n(E) = \sum_{n=0}^E d(E_n) \quad (2.21)$$

berechnet und bei verschiedenen Feldern für niedrige Energien gezeigt. Der erste Summand in (2.21) ist die Entartung $d(E_0)$ der Grundzustandsenergie $E_0 = E_G$. Der zweite Summand ist die Entartung der ersten Anregung ($n = 1$). Die Summe setzt sich bis zur n -ten Anregung, der Energie E , fort. Im extremen Quantenfall ist die Entartung

Tabelle 2.4.: Werte der Feldstärken h_n , bei denen die Magnetisierungen $m(h_n)$ springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen $m(h_n)$ für den Ring mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{2}$ sowie das Quadratgitter mit $N = 32$ und $s = \frac{1}{2}$.

| Ring $s = \frac{1}{2}$ | | Ring $s = 1$ | | Ring $s = \frac{5}{2}$ | | Quadrat $s = \frac{1}{2}$ | |
|------------------------|----------|--------------|----------|------------------------|----------|---------------------------|----------|
| h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ |
| 0.3558475 | 0.1667 | 0.4841964 | 0.0833 | 0.3780367 | 0.0333 | 0.3149941 | 0.0625 |
| 0.9610140 | 0.3333 | 0.8559313 | 0.1667 | 0.7538120 | 0.0667 | 0.6257209 | 0.1250 |
| 1.4187894 | 0.5000 | 1.2513599 | 0.2500 | 1.1255057 | 0.1000 | 0.9303346 | 0.1875 |
| 1.7327539 | 0.6667 | 1.6256386 | 0.3333 | 1.4923064 | 0.1333 | 1.2285697 | 0.2500 |
| 1.9189859 | 0.8333 | 1.9795665 | 0.4167 | 1.8540756 | 0.1667 | 1.5210779 | 0.3125 |
| 2.0000000 | 1.0000 | 2.3136396 | 0.5000 | 2.2111592 | 0.2000 | 1.8065218 | 0.3750 |
| | | 2.6348265 | 0.5833 | 2.5641070 | 0.2333 | 2.0824873 | 0.4375 |
| | | 2.9569723 | 0.6667 | 2.9134973 | 0.2667 | 2.3487572 | 0.5000 |
| | | 3.2905917 | 0.7500 | 3.2598537 | 0.3000 | 2.6047374 | 0.5625 |
| | | 3.6123366 | 0.8333 | 3.6036178 | 0.3333 | 2.8498549 | 0.6250 |
| | | 3.8644963 | 0.9167 | 3.9451492 | 0.3667 | 3.0838118 | 0.6875 |
| | | 4.0000000 | 1.0000 | 4.2847345 | 0.4000 | 3.3053179 | 0.7500 |
| | | | | 4.6225987 | 0.4333 | 3.5116752 | 0.8125 |
| | | | | 4.9589150 | 0.4667 | 3.6945911 | 0.8750 |
| | | | | 5.2938130 | 0.5000 | 3.8572818 | 0.9375 |
| | | | | 5.6273854 | 0.5333 | 4.0000000 | 1.0000 |
| | | | | \vdots | \vdots | | |
| | | | | 9.4962997 | 0.9333 | | |
| | | | | 9.7814221 | 0.9667 | | |
| | | | | 10.0000000 | 1.0000 | | |

d der Energien (2.16) durch

$$d = d_S d_{S_A} d_{S_B} \quad \text{mit} \quad (2.22)$$

$$d_S = 2S + 1 \quad \text{und} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned}
d_{S_{A,B}} &= \frac{2S_{A,B} + 1}{N/2 + S_{A,B} + 1} \binom{N}{N/2 - S_{A,B}} \\
&= \frac{(2S_{A,B} + 1) N!}{(N/2 + S_{A,B} + 1) (N - N/2 + S_{A,B})! (N/2 - S_{A,B})!} \quad (2.24)
\end{aligned}$$

Tabelle 2.5.: Entartung des Grundzustandes und der ersten Anregung des Lieb-Mattis-Systems sowie des Rings für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1$ und die Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_s, h_s, 1.05h_s$.

| | s | | $h = 0$ | $h_{M(1/3)}$ | $h_{E(1/3)}$ | $0.95h_s$ | h_s | $1.05h_s$ |
|------|------------------|----------------|---------|--------------|--------------|-----------|-------|-----------|
| LMS | $\frac{1}{2}, 1$ | Grundzustand | 1 | 1 | 2 | 1 | 2 | 1 |
| | | erste Anregung | 3 | 2 | 2 | 1 | 1 | 1 |
| Ring | $\frac{1}{2}, 1$ | Grundzustand | 1 | 1 | 1 | 1 | 2 | 1 |
| | | erste Anregung | 3 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |

gegeben [67]. Mit der Unterscheidung zwischen geraden und ungeraden $S_{A,B}$ findet man die Entartung im Fall von $s = 1$. Ist $S_{A,B}$ eine gerade Zahl, so gilt

$$d_{(S_{A,B}=2n)} = \sum_{l=0}^{(N/2-S_{A,B})/2} \frac{(N/2)!}{l!(S_{A,B}+l)!(N/2-S_{A,B}-2l)!} - \sum_{l=0}^{(N/2-S_{A,B}-2)/2} \frac{(N/2)!}{l!(S_{A,B}+1+l)!(N/2-S_{A,B}-1-2l)!} \quad (2.25)$$

und ist $S_{A,B}$ eine ungerade Zahl, dann ist die Entartung

$$d_{(S_{A,B}=2n+1)} = \sum_{l=0}^{(N/2-S_{A,B}-1)/2} \frac{(N/2)!}{l!(S_{A,B}+1)!(N/2-S_{A,B}-2l)!} - \frac{(N/2)!}{l!(S_{A,B}+1+l)!(N/2-S_{A,B}-1-2l)!}, \quad (2.26)$$

wobei hier $n = 0, 1, 2, \dots$ ist.

Neben $h = 0$ wurden ein Feld $h = h_{M(1/3)}$, welches sich ungefähr in der Mitte des $1/3$ -Plateaus befindet, und ein Feld $h = h_{E(1/3)}$, welches kurz vor dem Ende des $1/3$ -Plateaus liegt, ausgewählt. Darüber hinaus werden Ergebnisse für das Sättigungsfeld h_s und in der Nähe des Sättigungsfeldes bei $h = 0.95h_s$ sowie bei $h = 1.05h_s$ vorgestellt. Die integrierten Zustandsdichten des Lieb-Mattis-Systems und des Rings mit $N = 12$ sind in Abbildung 2.8 und Abbildung 2.9 für die niedrigsten Energien zu finden. In diesem Kapitel werden Energien und andere Eigenschaften als Vielfaches von $s(s+1)$ angegeben, um die Systeme mit unterschiedlichem s besser vergleichen zu können.

Die Anzahl der Zustände des Grundzustandes sowie der ersten Anregung sind beim Lieb-Mattis-System sowie beim Ring unabhängig von der Quantenzahl s . Dies ist beim Lieb-Mattis-System in Abbildung 2.8 gut zu erkennen, wohingegen man beim Ring in Abbildung 2.9 die Entartung in einigen Fällen nur erahnen kann. Unterschiede, aufgrund der Quantenzahl, treten erst nach der zweiten Anregung auf. In Tabelle 2.5 kann man die Entartungen des Grundzustandes und der ersten Anregung miteinander

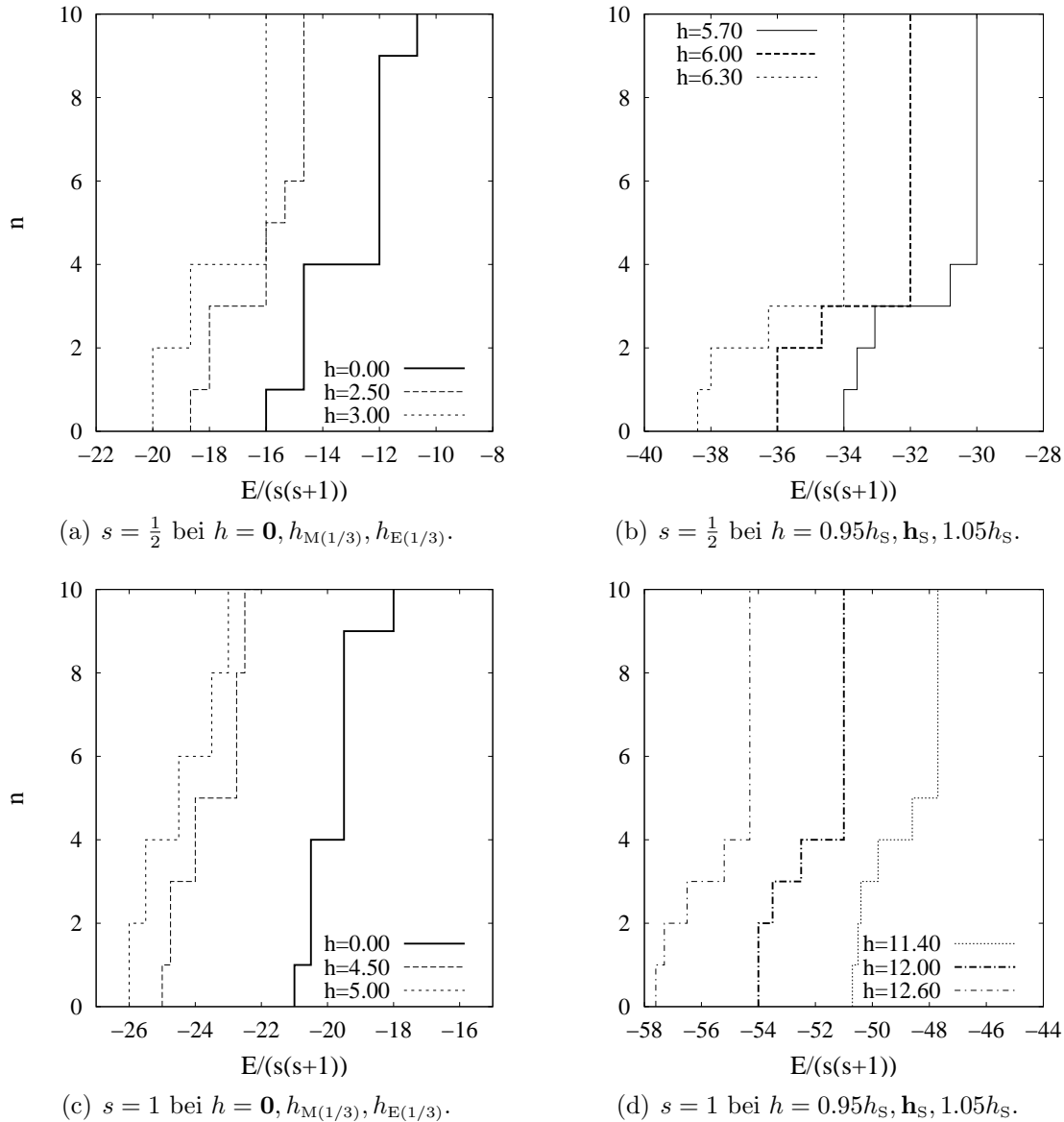


Abbildung 2.8.: Integrierte Zustandsdichte n des Lieb-Mattis-Systems mit $N = 12$ und (a) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$, (b) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$, (c) $s = 1$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ und (d) $s = 1$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$ in Abhängigkeit von $E/(s(s+1))$. Im Falle von $h = 0, h_S$ wurden dickere Linien verwendet, um diese Grenzfälle hervorzuheben.

vergleichen. Das Lieb-Mattis-System ist im Grundzustand und bei der ersten Anregung gleich oder stärker entartet als der Ring. Die Grundzustände sind beim Ring, außer bei der Sättigungs-Feldstärke, wo sie zweifach entartet sind, nicht entartet. Die erste Anregung ist beim Ring ohne angelegtes Feld dreifach entartet und bei den anderen betrachteten Feldern nicht entartet. Durch das Anlegen eines Feldes werden in beiden

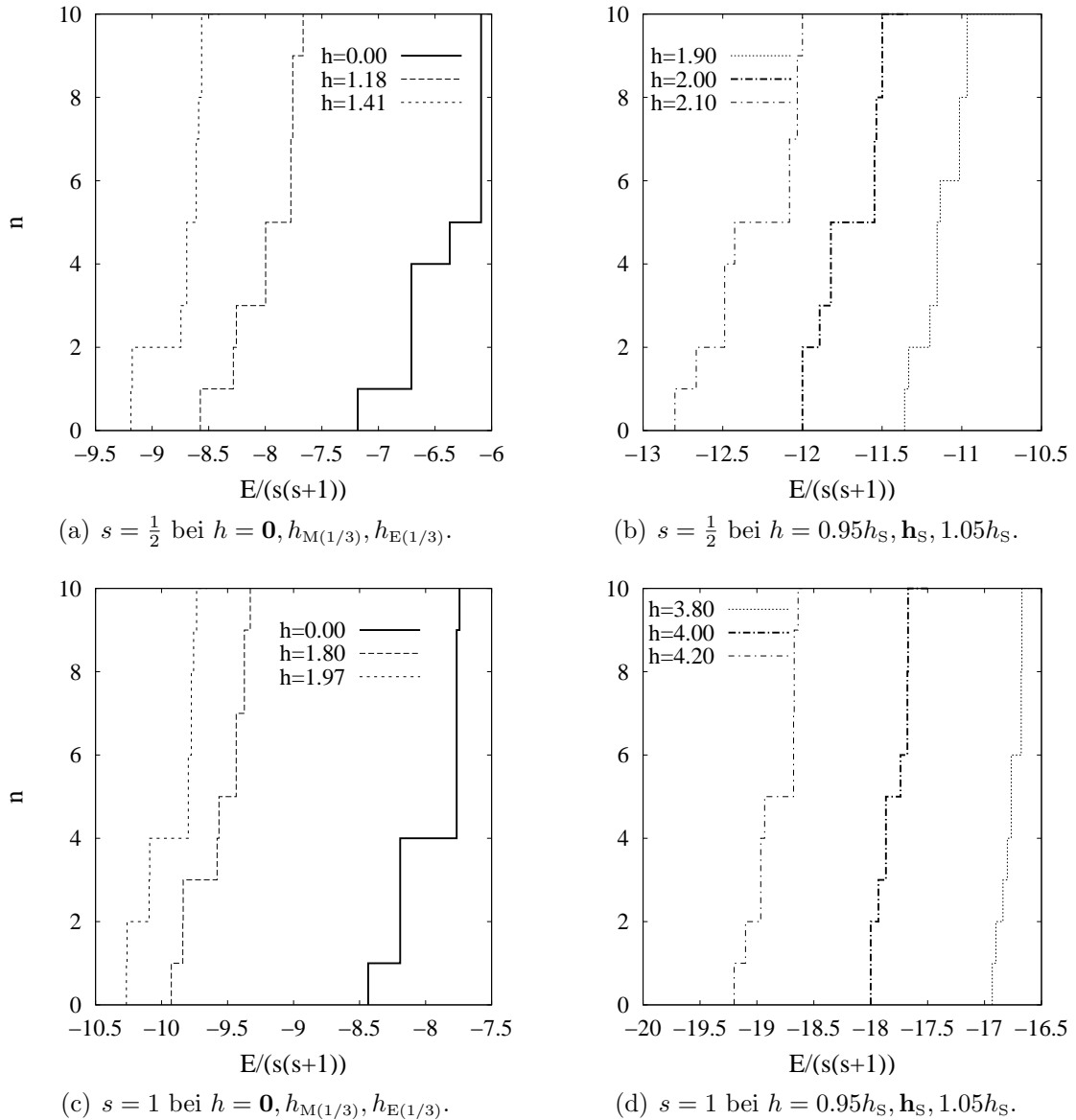


Abbildung 2.9.: Integrierte Zustandsdichte n des Rings mit $N = 12$ und (a) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$, (b) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$, (c) $s = 1$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ und (d) $s = 1$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$ in Abhängigkeit von $E/(s(s+1))$. Im Falle von $h = 0, h_S$ wurden dickere Linien verwendet, um diese Grenzfälle hervorzuheben.

Systemen erwartungsgemäß Entartungen aufgehoben, was man bei dem Vergleich der integrierten Zustandsdichte bei $h = 0$ mit den Zustandsdichten bei $h \neq 0$ erkennt. Die Entartungen des Grundzustandes und der ersten Anregung bei $h = 0, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$ sind bei beiden Systemen gleich.

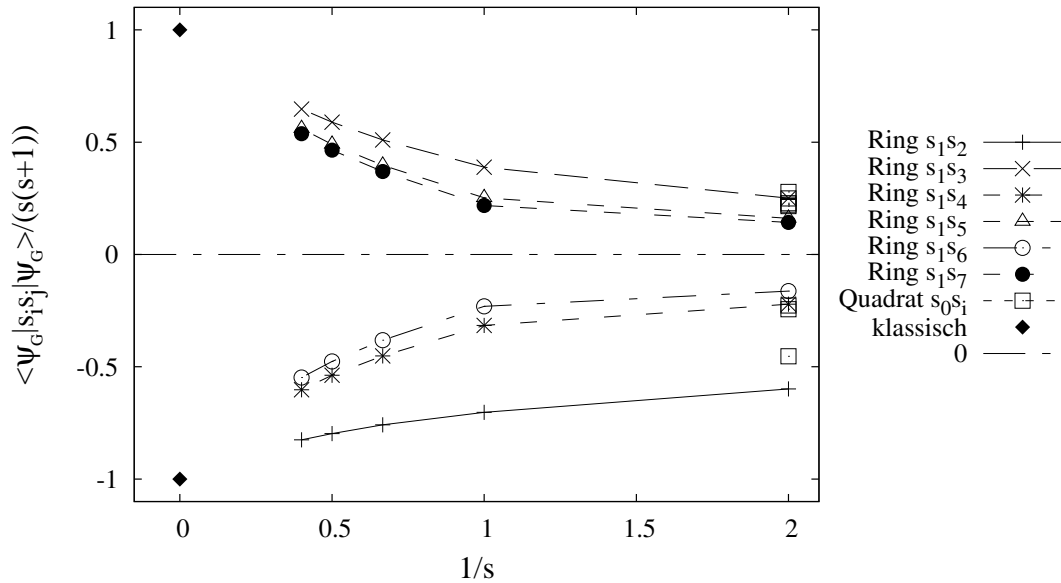


Abbildung 2.10.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | s_i s_j | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ des Rings mit $N = 12$ für $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$ und des Quadratgitters mit $N = 32$ für $s = \frac{1}{2}$ im Grundzustand in Abhängigkeit von $1/s$. Bei $1/s = 0$ werden die klassischen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, d.h. im Grenzfall $s \rightarrow \infty$, für $T = 0$ gezeigt. Die Linien verbinden lediglich die Datenpunkte.

2.3.5. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen

Einen interessanten Einblick in das Verhalten der Spins geben die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Die Anzahl der unterschiedlichen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ist von der Quantenzahl s unabhängig. Nun werden die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Rings mit $N = 12$ sowie des Quadratgitters mit $N = 32$ im Grundzustand und die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Rings in Abhängigkeit von der Temperatur behandelt. Aus Abbildung 2.2 wird deutlich, dass der Ring mit 12 Plätzen sechs unterschiedliche Spin-Spin-Korrelationsfunktionen besitzt. Die Nachbarschaftsverhältnisse im Quadratgitter können Abbildung 2.3 entnommen werden. Abbildung 2.10 zeigt die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | s_i s_j | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ des Rings mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$ und des Quadratgitters mit $N = 32$ für $s = \frac{1}{2}$ bei $T = 0$ in Abhängigkeit von $1/s$. In dieser Abbildung sind ebenfalls die klassischen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, die im Grenzfall $s \rightarrow \infty$ eingenommen werden, bei $1/s = 0$ zu finden. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gleicher Nachbarn sind durch Linien verbunden, und es ist die Nulllinie zur Orientierung dargestellt. Mit zunehmendem s nähern sich die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Rings ihrem klassischen Wert an. Die Ausrichtung der Spins und damit auch die antiferromagnetische Ordnung bleiben erhalten. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn sind am stärksten. Der geringer werdende Einfluss der Quantenfluktuationen lässt bei großen s die Unterschiede zwischen den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, die auf die Nachbarschaftsverhältnisse zwischen den

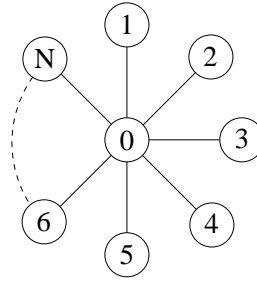


Abbildung 2.11.: Der Heisenbergstern. Ein zentraler Spin wechselwirkt über ein antiferromagnetisches Austauschintegral mit N nächsten Nachbarn, die ausschließlich mit dem zentralen Spin 0 gekoppelt sind.

Spins zurückzuführen sind, kleiner werden. In Abbildung 2.10 verhalten sich die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der Ringe mit halb- und ganzzahligem s gleich. Es ist kein Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Spins abzulesen, obwohl man dies bei eindimensionalen Spinsystemen [32] vermuten könnte. Für das Quadratgitter mit $N = 32$ und $s = \frac{1}{2}$ sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen aller Nachbarn mit einem leeren Quadrat dargestellt. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Quadratgitters sind den Abständen nach geordnet $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_1 | \psi_G \rangle = -0.34009$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_2 | \psi_G \rangle = 0.20901$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_8 | \psi_G \rangle = 0.18740$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_5 | \psi_G \rangle = -0.18296$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_6 | \psi_G \rangle = 0.17124$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_{15} | \psi_G \rangle = -0.17038$, $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_{14} | \psi_G \rangle = 0.16645$ und $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_{22} | \psi_G \rangle = 0.16165$. Der maximale Wert wird zwischen nächsten Nachbarn angenommen. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen nehmen allmählich mit zunehmendem Abstand bis knapp auf die Hälfte ab. Im Vergleich mit dem Ring fällt auf, dass die nächsten Nachbarn des Quadratgitters schwächer korreliert sind als beim Ring. Das ist auf die größere Anzahl nächster Nachbarn zurückzuführen. Untersuchungen des Heisenbergsterns in [68] bestätigen, dass sich die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen mit zunehmender Anzahl der nächsten Nachbarn verringern. Für den Heisenbergstern, der in Abbildung 2.11 zu sehen ist, besteht nach [68] die Beziehung

$$\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_i | \psi_G \rangle = -\frac{1}{4} - \frac{1}{2(N-1)}. \quad (2.27)$$

Bei den übernächsten Nachbarn ist die Situation umgekehrt. Wie man in Abbildung 2.10 ebenfalls sieht, sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen von Nachbarn mit großen Abständen beim Quadratgitter stärker als beim Ring, was auf den stärkeren Einfluss der Quantenfluktuationen in einer Dimension zurückgeführt werden kann.

Die Wirkung der thermischen Fluktuationen auf die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Rings mit $N = 12$ kann bei $h = 0$ in Abbildung 2.12 (a) für $s = \frac{1}{2}$ und (b) für $s = 1$ betrachtet werden. In der Abbildung ist nur schwerlich zu erkennen, dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_5 \rangle$ und $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_6 \rangle$ im extremen Quantenfall, was ihren absoluten Wert, also die Stärke betrifft, erst ab einem Wert von $T/(s(s+1)) = 0.12$

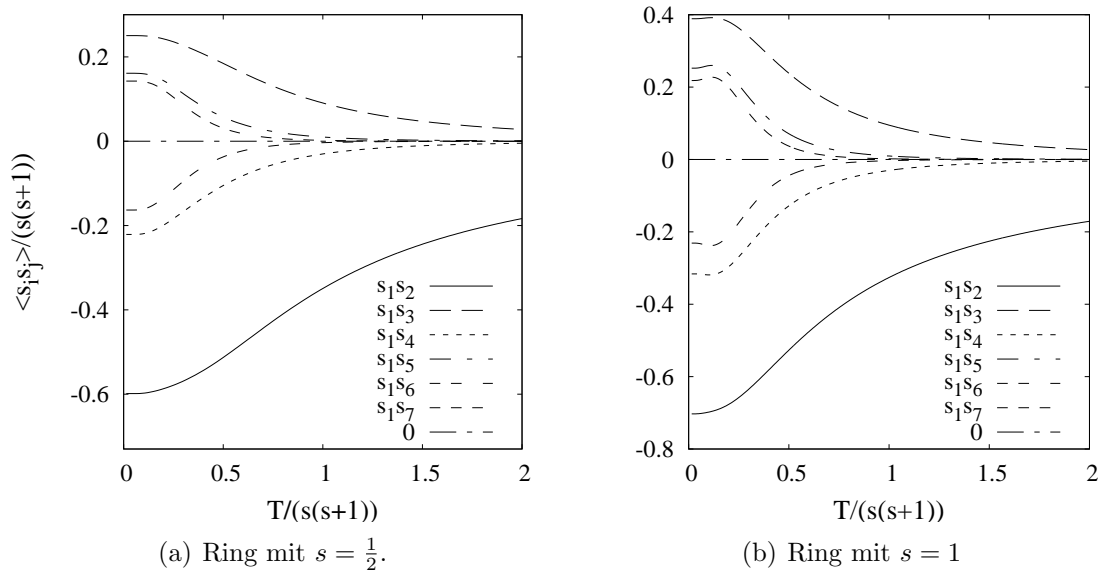


Abbildung 2.12.: Die sechs Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ des Rings mit $N = 12$ für (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) mit $s = 1$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$ bei $h = 0$. Zur Orientierung wurde auch eine Linie bei Null dargestellt.

den Abständen entsprechend geordnet sind. Alle anderen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sind bereits bei kleineren Temperaturen der Distanzen zwischen den Plätzen entsprechend geordnet. Im Grenzwert großer Temperaturen lassen die thermischen Fluktuationen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen völlig verschwinden. Bei $s = 1$ ist ein interessanter Effekt zu beobachten, alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, außer die der nächsten Nachbarn, werden zunächst stärker und dann wieder kleiner. In [31] wurde diese Eigenschaft auch bei zweidimensionalen Systemen nachgewiesen und als „order from disorder“-Effekt bezeichnet. Typisch für bipartite Systeme ist die antiferromagnetische Einstellung nächster Nachbarn sowie die ferromagnetische von übernächsten Nachbarn, die sich mit den Abständen alternierend bis zu den Nachbarn mit dem größten Abstand fortsetzt.

Das Verhalten der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Ringes mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}$ unter dem Einfluss thermischer Fluktuationen kann für die Felder $h_{A(1/3)}$, $h_{M(1/3)}$, $h_{E(1/3)}$, $0.95h_s$ in Abbildung 2.13 und für die Felder h_s , $1.05h_s$ in Abbildung 2.14 betrachtet werden. Zusätzlich zu den Feldern, für die bereits Untersuchungen der integrierten Zustandsdichte gemacht wurden, sind in Abbildung 2.13 (a) die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen am Anfang des $1/3$ -Plateaus dargestellt. Mit den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei $h_{A(1/3)}$, $h_{M(1/3)}$ und $h_{E(1/3)}$ werden die Veränderungen innerhalb des $1/3$ -Plateaus angedeutet. Es ist im Vergleich der Abbildung 2.13 (a), (b) und (c) zu erkennen, dass sich mit zunehmender Feldstärke die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen verringern. Wie zu erwarten, tritt die ferromagnetische Ausrichtung mit größerem h bei tieferen Temperaturen auf. In der Nähe der Sättigung bei $0.95h_s$ sind

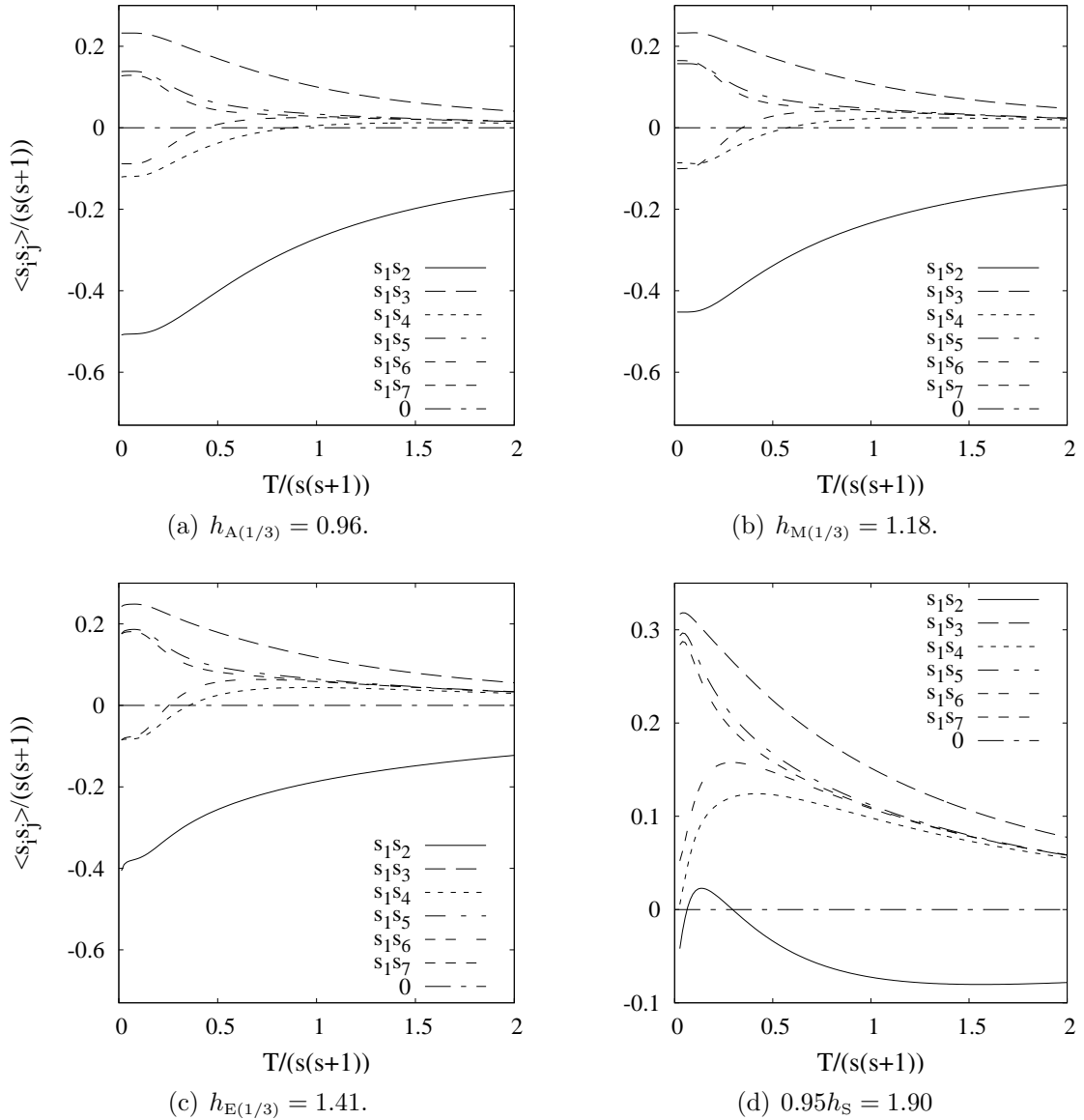


Abbildung 2.13.: Die sechs Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ des Rings mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}$ in (a) bei $h_{A(1/3)} = 0.96$, (b) $h_{M(1/3)} = 1.18$, (c) $h_{E(1/3)} = 1.41$ und in (d) $0.95h_S = 1.90$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Zur Orientierung wurde auch eine Linie bei Null dargestellt.

die nächsten Nachbarn nicht mehr in allen Temperaturbereichen am stärksten korreliert. Sie sind bei sehr tiefen Temperaturen antiferromagnetisch, danach ferromagnetisch und nähern sich anschließend antiferromagnetisch dem Wert Null. Schreibt man die ferromagnetische Ausrichtung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn dem von außen angelegten Feld zu, so kann man zu dem Schluss kommen, dass der Einfluss des Feldes in dem Temperaturbereich der positiven Spin-Spin-Kor-

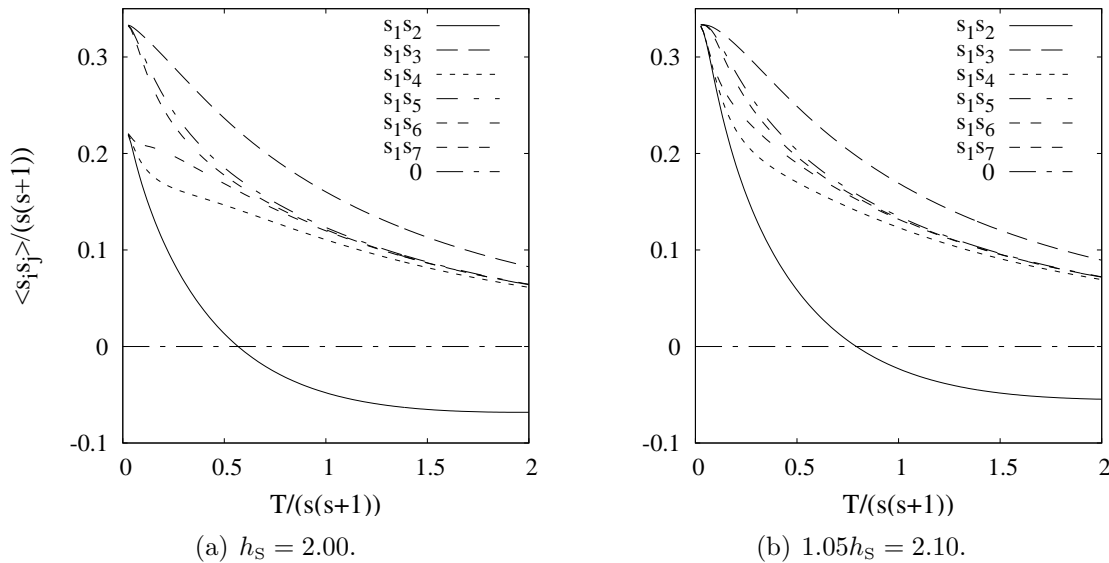


Abbildung 2.14.: Die sechs Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ des Rings mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}$ bei (a) $h_s = 2$ und (b) $1.05h_s = 2.1$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Zur Orientierung wurde auch eine Linie bei Null dargestellt.

relationsfunktionen am größten ist. Am Sättigungsfeld h_s und bei $1.05h_s$ sind alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei tiefen Temperaturen ferromagnetisch. Aus Abbildung 2.14 (a) und (b) ist außerdem ersichtlich, dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn unter dem Einfluss der thermischen Fluktuationen einmal ihr Vorzeichen wechseln, wobei sich der Übergang mit zunehmender Feldstärke zu höheren Temperaturen verschiebt. Während sich am Sättigungsfeld h_s (Abbildung 2.14 (a)) beim Annähern an den Nullpunkt die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten, drittnächsten und fünftnächsten Nachbarn einem Wert und die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der übernächsten, viertnächsten und sechsnächsten Nachbarn einem anderen Wert annähern, streben bei $1.05h_s$ (Abbildung 2.14 (b)) alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gegen den gleichen Wert bei $T \rightarrow 0$.

2.3.6. Spezifische Wärmen

Die Spezifische Wärme ist eine thermodynamische Eigenschaft, die stark von den niedrig liegenden Anregungen dominiert ist. Sie berechnet sich nach

$$C = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} . \quad (2.28)$$

Ein Maximum in der spezifischen Wärme kann ein Hinweis auf eine Veränderung der magnetischen Ordnung sein. Zunächst wird die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ in Ab-

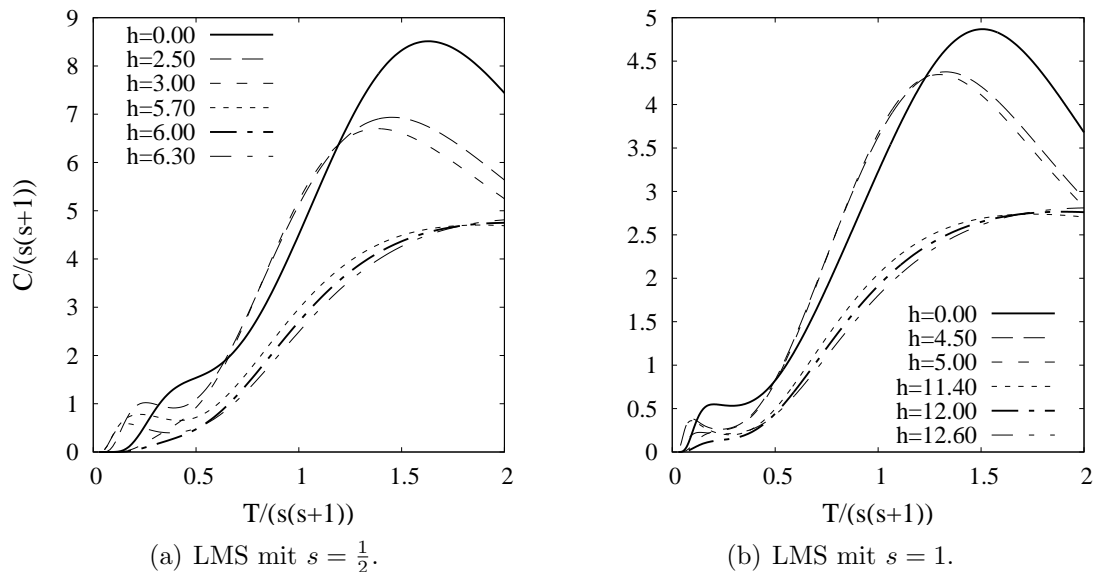


Abbildung 2.15.: Die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ des Lieb-Mattis-Systems mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Gezeigt werden die spezifischen Wärmen für $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ sowie in der Nähe und bei der Sättigungs-Feldstärke $0.95h_s, h_s, 1.05h_s$.

hängigkeit von $T/(s(s+1))$ für das Lieb-Mattis-System mit $s = \frac{1}{2}, 1$ in Abbildung 2.15 gezeigt und danach die spezifische Wärme des Rings mit $s = \frac{1}{2}, 1$ in Abbildung 2.16. Wie schon bei der integrierten Zustandsdichte wurde die spezifische Wärme für die Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_s, h_s, 1.05h_s$ berechnet. Für den Ring mit $s = \frac{1}{2}$ ist zum Vergleich mit den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen zusätzlich noch die spezifische Wärme am Anfang des $1/3$ -Plateaus, d.h. bei $h_{A(1/3)}$, aufgeführt. Zur besseren Unterscheidung der Felder sind die Grenzfälle $h = 0, h_s$ mit dickeren Linien dargestellt. Bei allen Systemen kann man unabhängig von der Dimension und der Struktur ein Maximum in der spezifischen Wärme bei relativ hohen Temperaturen finden, wobei gilt $T \propto J$. Zusätzliche stark ausgeprägte Maxima bei tieferen Temperaturen können auf Unterschiede in der Struktur der Systeme zurückgeführt werden. Mit dem im Folgenden verwendeten Begriff „Tieftemperatur-Maxima“ werden in dieser Arbeit die Maxima bezeichnet, die im Falle von mehreren auftretenden Maxima, bei den tiefen Temperaturen zu finden sind. Die Tieftemperatur-Maxima sind allerdings, im Vergleich mit den Maxima, welche bei etwas höheren Temperaturen in allen Systemen existieren, bei dem Lieb-Mattis-System relativ schwach ausgeprägt. Im extremen Quantenfall besitzt das Lieb-Mattis-System keine Tieftemperatur-Maxima bei $h = 0, h_{E(1/3)}, h_s$. Im Fall von $s = 1$ zeigen lediglich die spezifischen Wärmen bei den Feldern $h = h_{E(1/3)}, h_s$ keine Tieftemperatur-Maxima.

Um einen Eindruck vom Gesamtverhalten zu geben, zeigen die kleinen Diagramme in Abbildung 2.16 die Temperatur-Abhängigkeit der spezifischen Wärme des Rings in einem größeren Temperatur-Bereich ($[0,1]$). Der vergrößerte, im großen Diagramm

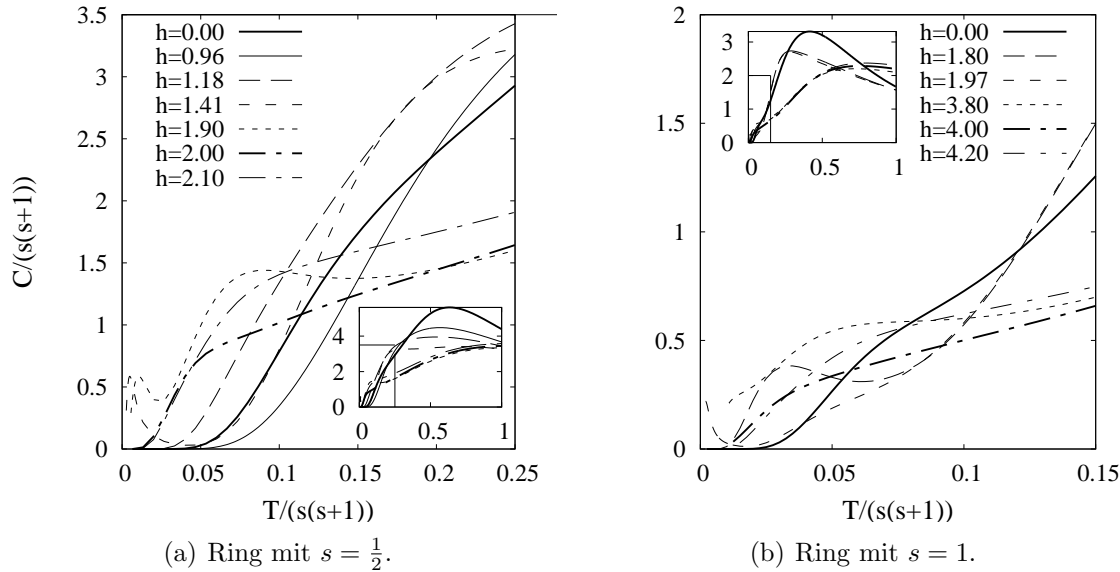


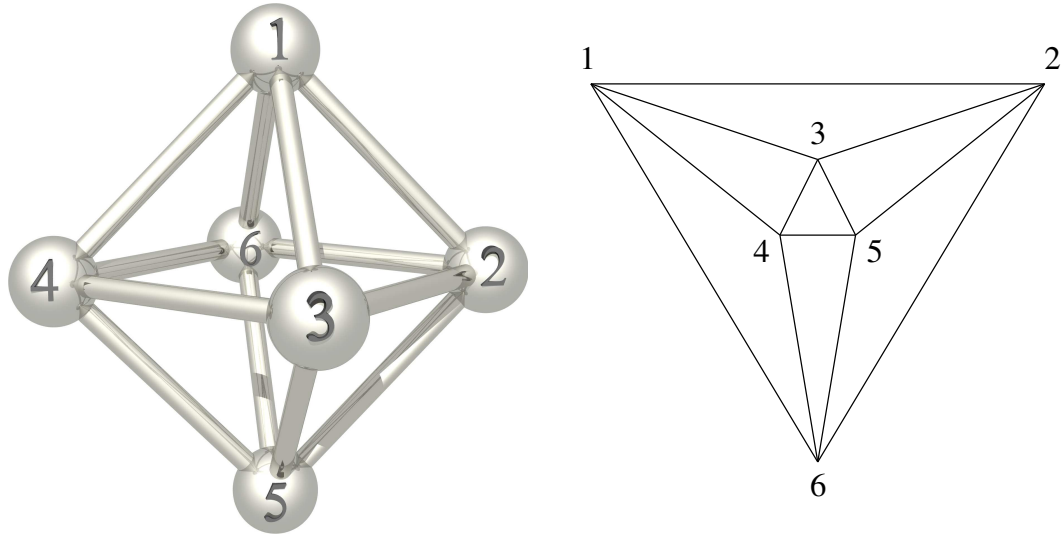
Abbildung 2.16.: Die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ des Rings mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von $T/s(s+1)$. In den kleinen Diagrammen ist zur Orientierung ein größerer Temperaturbereich dargestellt als in den großen Diagrammen. Gezeigt werden die spezifischen Wärmen für $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ sowie in der Nähe und bei der Sättigungs-Feldstärke $0.95h_S, h_S, 1.05h_S$.

dargestellte Bereich, ist in den kleinen Diagrammen umrandet.

Bei $h = h_{E(1/3)}$ kann man beim Ring mit $s = \frac{1}{2}$ deutlich ein Tieftemperatur-Maximum erkennen und bei $h = 0.95h_S$ zwei Tieftemperatur-Maxima. Der Ring mit $s = 1$ zeigt bei $h = h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S$ ein Tieftemperatur-Maximum. Die Abwesenheit eines Tieftemperatur-Maximum im Fall von $h = 0$ könnte damit in Verbindung gebracht werden, dass der Ring keine niedrig-liegende $S = 0$ -Energien besitzt, da er nicht frustriert ist. Niedrig-liegende $S = 0$ -Energien sind Energien, die unterhalb der ersten Triplettenenergie oder geringfügig höher als die erste Triplettenenergie liegen. Aus der Diskussion beider Systeme geht deutlich hervor, dass es bei $h = 0$ keine oder nur schwach ausgeprägte Tieftemperatur-Maxima, wie beim Lieb-Mattis-System mit $s = 1$, in unfrustrierten Systemen gibt.

2.4. FRUSTRIERTE SYSTEME: DAS OKTAEDER

An die Betrachtung der unfrustrierten Systeme schließt sich nun das Studium der frustrierten Systeme an, welches mit dem Oktaeder beginnt. In Abbildung 2.17 sind das Oktaeder und eine zweidimensionale Projektion dieses Platonischen Körpers zu finden. Die acht Dreiecke, aus denen das Oktaeder besteht, führen zur Frustration in diesem System. Wie man Abbildung 2.17 entnehmen kann, teilen sich die Dreiecke Kanten miteinander. Das sich aus dem Hamilton-Operator (1.4) ergebende Eigenwertproblem ist exakt lösbar, denn das Oktaeder ist ein Lieb-Mattis-System. Jeder Spin wechsel-



(a) Dreidimensionale Darstellung.

(b) Zweidimensionale Projektion.

Abbildung 2.17.: Eine dreidimensionale Darstellung des Oktaeders in (a) sowie die zweidimensionale Projektion in (b). In (a) symbolisieren die Kugeln die Eckpunkte, an denen Spins sitzen, und die Zylinder die Bindungen. Bei der zweidimensionalen Darstellung in (b) sind die nummerierten Eckpunkte die Plätze, an denen die jeweiligen Spins sitzen. Die Bindungen sind durch Linien gekennzeichnet.

wirkt ausschließlich mit allen Spins aus jedem der beiden anderen Untergitter. Im Unterschied zum unfrustrierten Lieb-Mattis-System im Abschnitt 2.3 ist das Oktaeder frustriert und besteht aus drei Untergittern, die jeweils zwei Spins besitzen.

Gleichung (1.4) kann auch als

$$H = \frac{J}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_{1,5}^2 - \mathbf{S}_{2,4}^2 - \mathbf{S}_{3,6}^2) - hS^z, \quad (2.29)$$

geschrieben werden, wobei $\mathbf{S}_{1,5}$, $\mathbf{S}_{2,4}$ und $\mathbf{S}_{3,6}$ die Summen von sich gegenüber befindlichen Spins sind, die zu einem Untergitter gehören. Im extremen Quantenfall besitzt das Oktaeder $2^6 = 64$ Zustände. Bei $s = 1$ finden wir 4096 Zustände und bei $s = \frac{7}{2}$ charakterisieren $8^6 = 262144$ Zustände die Eigenschaften des Oktaeders. Für die drei Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$ werden nun einige Eigenschaften des Hamilton-Operators (1.4) vorgestellt. Als größte Quantenzahl s wurde $s = \frac{7}{2}$ gewählt, da für das Kuboktaeder in Abschnitt 2.5 die niedrigsten Energien eines jeden S -Raumes bis zu dieser Quantenzahl berechnet werden konnten. Durch den Vergleich der Eigenschaften bei unterschiedlichen Quantenzahlen s kann der Einfluss der Quantenfluktuationen in diesem frustrierten System untersucht werden.

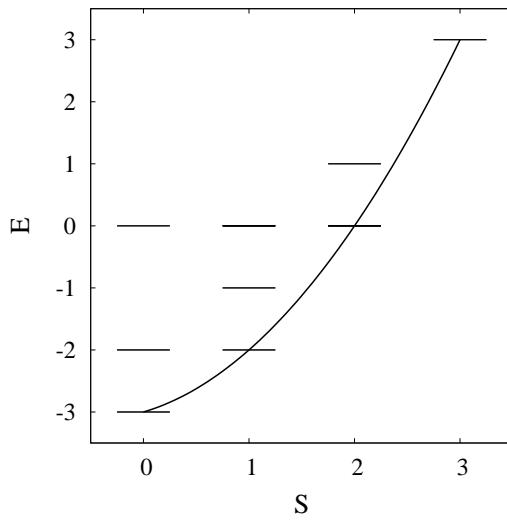
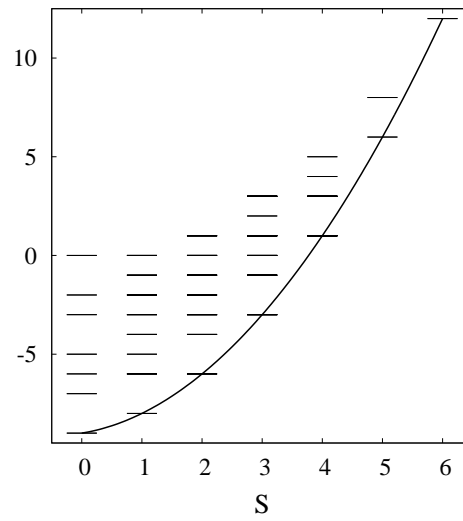
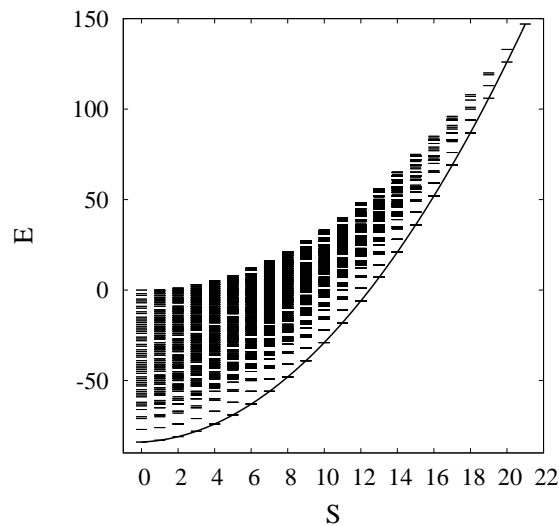
(a) Oktaeder mit $s = \frac{1}{2}$.(b) Oktaeder mit $s = 1$.(c) Oktaeder mit $s = \frac{7}{2}$.

Abbildung 2.18.: Das Spektrum des Oktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$, (b) $s = 1$ und (c) $s = \frac{7}{2}$ in Abhängigkeit von S . Des Weiteren ist die Kurve für $E_{S,\min} = E_{S,\min}^{\text{approx}}$ ((2.6), (2.7)) zu sehen. Die niedrigsten Energien eines jeden Raumes von S sind genau durch das Rotationsband beschrieben.

2.4.1. Spektren

Die Energie-Spektren des Oktaeders mit $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$ und $s = \frac{7}{2}$ sind für $h = 0$ in Abbildung 2.18 dargestellt. In [57] wird das Spektrum des Oktaeders mit $s = \frac{5}{2}$ vorgestellt. Die Energien sind für alle s und $h = 0$ aus dem Bereich der ganzen Zahlen. Typisch für Lieb-Mattis-Systeme liefern $E_{S,\min}$ (Gleichung (2.6)) und $E_{S,\min}^{\text{approx}}$

(Gleichung (2.7)) dasselbe Ergebnis. Aus diesem Grund ist nur eine Kurve in den Abbildungen der Spektren zu finden. Natürlich liegen die niedrigsten Energien jedes S-Raumes genau auf dem Rotationsband. Demzufolge existiert keine Abweichung $\Delta_{S,\min}$ (Gleichung (2.9)) und $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.10)). Beim Anschauen von Abbildung 2.18 (c) kann man zu dem Schluss kommen, dass für große s ein zweites oder auch drittes Rotationsband gefunden werden kann, welches die Energien der ersten und zweiten Anregung eines jeden S-Raumes beschreibt.

Die Grundzustände sind nicht entartete Singulett ($S = 0$). Während für $s = \frac{1}{2}$ die erste Singulett-Anregung den gleichen Wert hat wie das kleinste Triplett ($S = 1$), ist die Singulett-Triplett-Anregungslücke bei $s > \frac{1}{2}$ kleiner als die Differenz zwischen dem Grundzustand und der ersten Singulett-Anregung. Die höchste Singulett-Energie nimmt in den betrachteten Systemen den Wert Null an, wie auch die höchste Triplett-Energie. Der Quotient $(E_{\text{FM}} - \max\{E(S = 0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}}) = 0.42$, der als ein Maß für die Stauchung der höchsten Energien angesehen werden kann, ist 0.5, 0.57, 0.63 für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$. Er wird zum Vergleich mit den unfrustrierten Lieb-Mattis-Systemen ebenfalls in Tabelle 2.9 aufgeführt. Die Tabelle belegt, dass die Stauchung der höchsten Energien der S -Räume mit abnehmendem Einfluss der Quantenfluktuationen ebenfalls geringer wird. Im Vergleich mit dem unfrustrierten Lieb-Mattis-System sind die höchsten Energien des Oktaeders weniger gestaucht.

Die Spektralkoeffizienten $c_n(6, s) = 6$ sind beim Oktaeder unabhängig von s und n . Die Unabhängigkeit der Spektralkoeffizienten von s und n zeigt, dass die Rotationsbänder die niedrigsten Energien der S -Räume exakt beschreiben. Sie kann darauf zurückgeführt werden, dass das Oktaeder ein Lieb-Mattis-System ist.

2.4.2. Grundzustandsmagnetisierungen

In Abbildung 2.19 werden die Grundzustandsmagnetisierungen des Oktaeders mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$ und die klassische Magnetisierung ($s \rightarrow \infty$) bei $T = 0$ in Abhängigkeit von h/s gezeigt. Die Magnetisierungskurven bestehen wieder aus Ns Sprüngen, wie bei dem unfrustrierten Lieb-Mattis-System in Abschnitt 2.3.3. Typisch für Lieb-Mattis-Systeme sind alle Plateaus und Sprünge von der gleichen Größe. Die Frustration im Oktaeder lässt die Grundzustandsmagnetisierung unverändert im Vergleich zu dem unfrustrierten Lieb-Mattis-System des vorangegangenen Abschnitts 2.3.3. Die Magnetisierung des klassischen Modells nimmt linear zu. Mit größer werdendem s konvergiert $m(h/s)$ gegen die klassische Gerade, wobei an den Sprungstellen im quantenmechanischen Modell schon die klassischen Werte eingenommen werden. In Tabelle 2.6 sind die Feldstärken h_n angegeben, an denen die Magnetisierungen springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen. Die Sättigungs-Feldstärke h_s nimmt bei Lieb-Mattis-Systemen den gleichen Wert an wie die Spektralkoeffizienten.

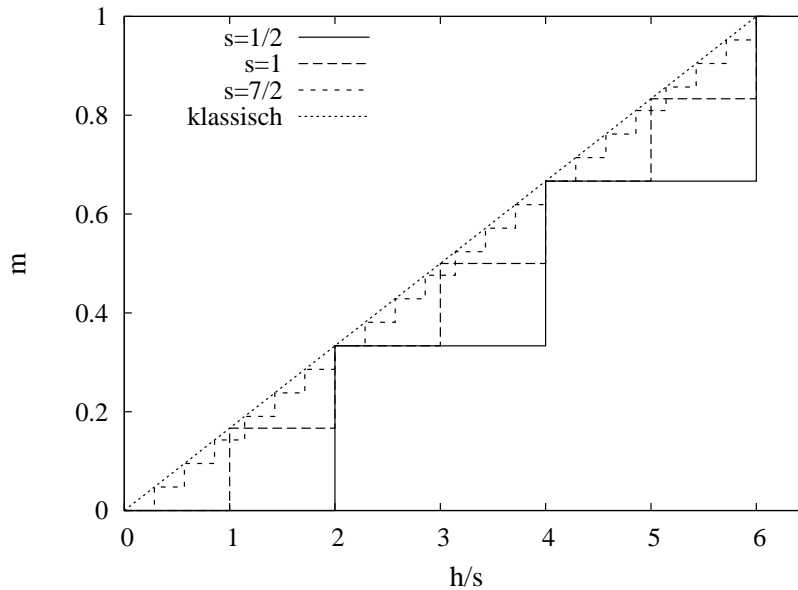


Abbildung 2.19.: Die Grundzustandsmagnetisierung des Oktaeders mit $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$ und $s = \frac{7}{2}$ sowie die klassische Magnetisierung ($s \rightarrow \infty$) bei $T = 0$ in Abhängigkeit von h/s .

2.4.3. Integrierte Zustandsdichte

Die integrierte Zustandsdichte der niedrigsten Energien des Oktaeders mit $s = \frac{1}{2}$, 1 , $\frac{7}{2}$ wird in Abbildung 2.20 für unterschiedliche Felder über $E/(s(s+1))$ gezeigt. Im Fall von $s = \frac{7}{2}$ sind die Grundzustandsenergien in der Nähe der Sättigung weit von den Grundzustandsenergien bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ entfernt. Aus diesem Grund ist die integrierte Zustandsdichte für diese Quantenzahl in zwei Diagrammen dargestellt.

Wie man der Abbildung 2.20 entnehmen kann, ist der Grundzustand bei den drei Quantenzahlen s für $h = 0$ und $1.05h_s$ nicht entartet, wohingegen die Entartung des Grundzustands bei $h_{M(1/3)}$ und dann auch bei $h_{E(1/3)}$ zunimmt. Kaum erkennbar ist, dass der Grundzustand bei $s = \frac{7}{2}$ und einem angelegten Feld von $h = 0.95h_s$, wie auch in der Sättigung, dreifach entartet ist.

Die Diagramme zeigen, dass die Entartung der meisten Zustände am stärksten bei großen Feldern aufgehoben wird. Dies ist unabhängig von s . In Tabelle 2.7 werden die Entartungen des Grundzustandes und der ersten Anregung in Zahlenwerten angegeben.

2.4.4. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen

Abbildung 2.17 zeigt, dass es beim Oktaeder zwei unterschiedliche Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gibt. Das sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten und der übernächsten Nachbarn. Sie sind in Abbildung 2.21 für $T = 0$ und $s = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{7}{2}$ in (a) sowie für $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$ und $T > 0$ in (b) dargestellt. Aus (a) wird deutlich,

Tabelle 2.6.: Werte der Feldstärke h_n , an denen die Magnetisierungen $m(h_n)$ springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen für das Oktaeder mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$.

| h_n | $m(h_n)$ des Oktaeders für $s =$ | | |
|-------|----------------------------------|--------|---------------|
| | $\frac{1}{2}$ | 1 | $\frac{7}{2}$ |
| 1 | 0.3333 | 0.1667 | 0.0476 |
| 2 | 0.6667 | 0.3333 | 0.0952 |
| 3 | 1.0000 | 0.5000 | 0.1429 |
| 4 | | 0.6667 | 0.1905 |
| 5 | | 0.8333 | 0.2381 |
| 6 | | 1.0000 | 0.2857 |
| 7 | | | 0.3333 |
| 8 | | | 0.3810 |
| 9 | | | 0.4286 |
| 10 | | | 0.4762 |
| 11 | | | 0.5238 |
| 12 | | | 0.5714 |
| 13 | | | 0.6190 |
| 14 | | | 0.6667 |
| 15 | | | 0.7143 |
| 16 | | | 0.7619 |
| 17 | | | 0.8095 |
| 18 | | | 0.8571 |
| 19 | | | 0.9048 |
| 20 | | | 0.9524 |
| 21 | | | 1.0000 |

Tabelle 2.7.: Entartung des Grundzustandes und der ersten Anregung für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$ und die Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$.

| s | | $h = 0$ | $h_{M(1/3)}$ | $h_{E(1/3)}$ | $0.95h_S$ | h_S | $1.05h_S$ |
|---------------|----------------|---------|--------------|--------------|-----------|-------|-----------|
| $\frac{1}{2}$ | Grundzustand | 1 | 3 | 5 | 2 | 3 | 1 |
| | erste Anregung | 12 | 3 | 8 | 1 | 6 | 2 |
| 1 | Grundzustand | 1 | 5 | 9 | 2 | 3 | 1 |
| | erste Anregung | 9 | 7 | 6 | 1 | 3 | 2 |
| $\frac{7}{2}$ | Grundzustand | 1 | 15 | 29 | 3 | 3 | 1 |
| | erste Anregung | 9 | 27 | 26 | 2 | 3 | 2 |

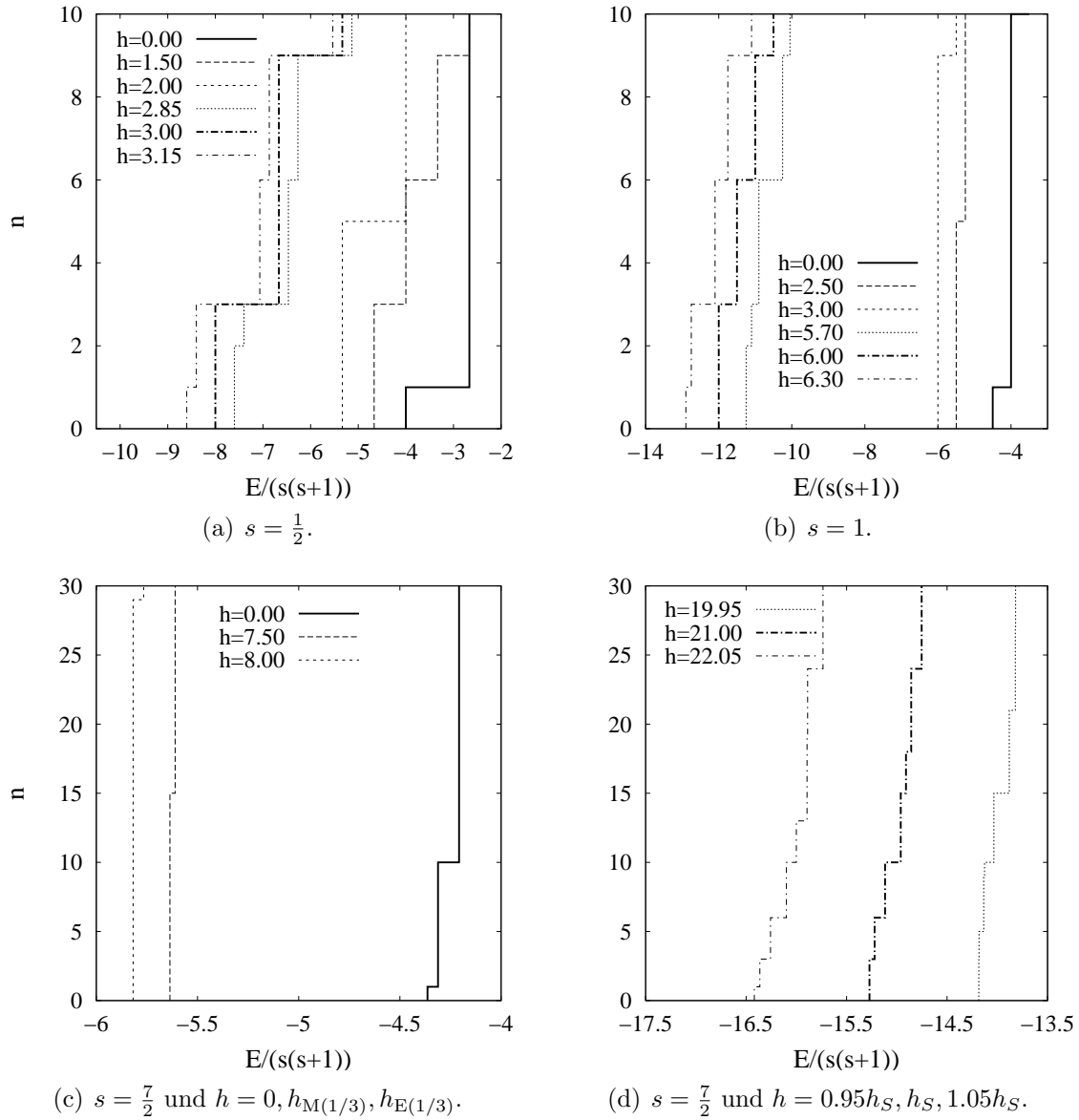


Abbildung 2.20.: Integrierte Zustandsdichte n des Oktaeders bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$ in Abhängigkeit von $E/(s(s+1))$. In (a) und (b) werden für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ alle Felder in einem Diagramm dargestellt, wohingegen für $s = \frac{7}{2}$ zwei Diagramme ((c),(d)) die integrierte Zustandsdichte zeigen.

dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen mit zunehmendem s gegen ihre klassischen Werte -0.5 und 1 streben. Demnach verringern Quantenfluktuationen, analog wie auch thermische Fluktuationen, die magnetische Ordnung. Es scheint ohne Einfluss zu sein, ob s halbzahlig oder ganzzahlig ist. Nach Schmidt und Luban [63] gibt es, im Grenzfall $s \rightarrow \infty$, beim Oktaeder lediglich komplanare, d.h. in einer Ebene liegende, Zustände

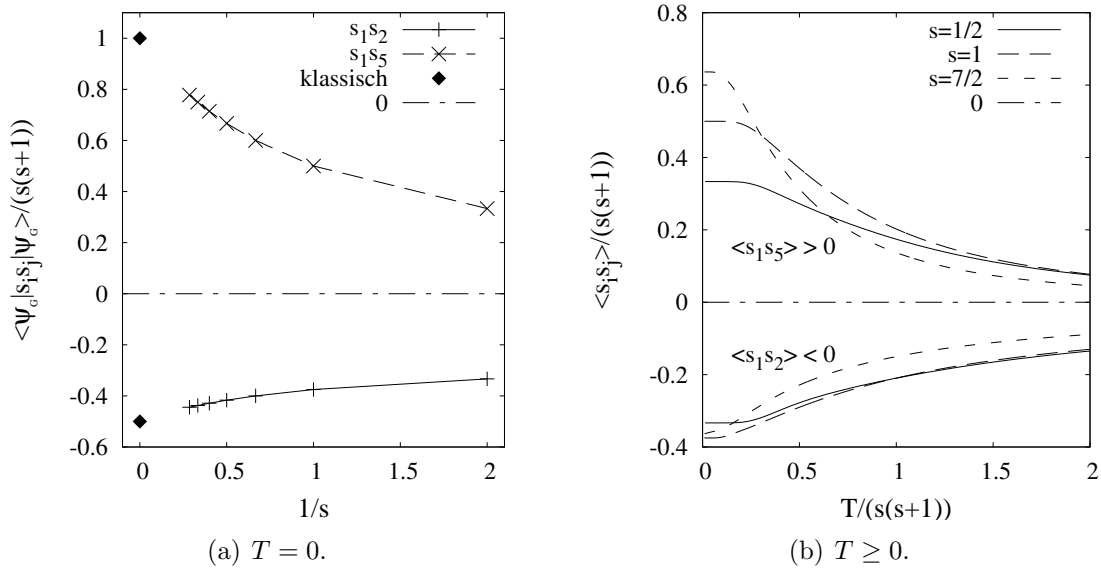


Abbildung 2.21.: (a) Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | s_i s_j | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ im Grundzustand in Abhängigkeit von $1/s$ für $s = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{7}{2}$. Die Kurven sind nur eine Verbindung der Korrelationen. Bei $1/s = 0$ ist der klassische Grenzfall ($s \rightarrow \infty$) dargestellt. (b) Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Oktaeders $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ mit $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$ und $s = \frac{7}{2}$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Die Strich-Punkt-Linie markiert den Wert Null zur Orientierung.

mit $M = 0$.

Die Änderung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$ in Abbildung 2.21 (b) zeigt, dass die thermischen Fluktuationen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen schwächen. Man kann in dieser Darstellung ebenfalls erkennen, dass die Quantenfluktuationen dem Einfluss der thermischen Fluktuationen entgegenwirken. Betrachtet man kleine Temperaturen in Abbildung 2.21 (b) so stellt man fest, dass mit Zunahme der Quantenfluktuationen, d.h. kleiner werdendem s , die Schwächung der Ordnung bei größeren Temperaturen einsetzt. Auch bei großen Temperaturen scheinen Systeme mit stärkeren Quantenfluktuationen resistenter gegen den Einfluss der thermischen Fluktuationen zu sein. Im extremen Quantenfall, d.h. für $s = \frac{1}{2}$, haben die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten und der übernächsten Nachbarn den gleichen absoluten Wert. Das Erhöhen der Temperatur lässt den Unterschied zwischen den nächsten und den übernächsten Nachbarn hervortreten. Wie zu erwarten verschwinden die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der weiter voneinander entfernten Nachbarn schneller als die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn.

Es gibt weder im Grundzustand (Abbildung 2.21 (a)) noch für Temperaturen $T > 0$ (b) einen Vorzeichenwechsel bei den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Demnach bleiben nächste Nachbarn antiferromagnetisch und übernächste Nachbarn ferromagnetisch zueinander eingestellt.

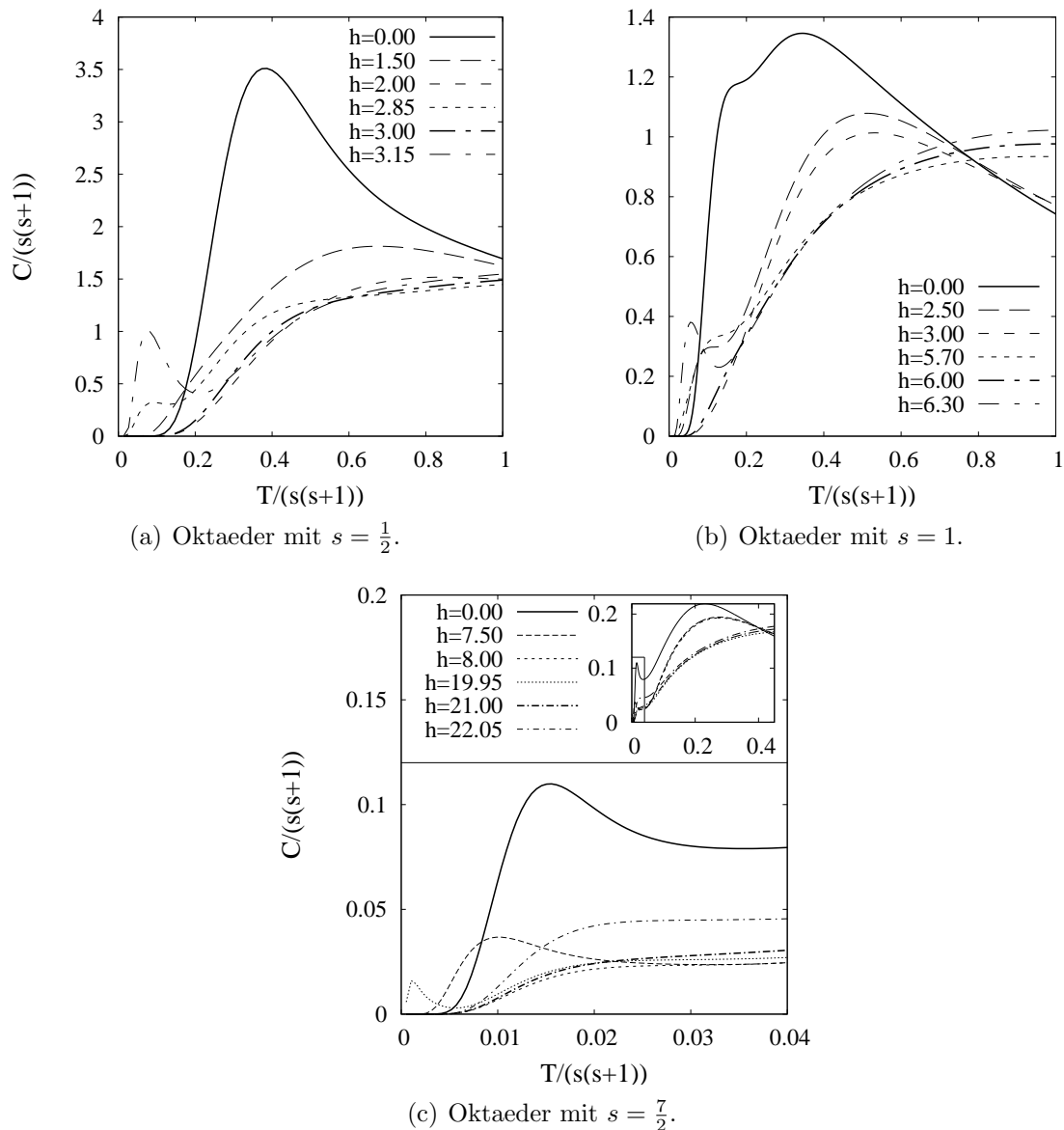


Abbildung 2.22.: Die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ des Oktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$, (b) $s = 1$ und (c) $s = \frac{7}{2}$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Gezeigt werden die spezifischen Wärmen für $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$. Die dickeren Linien wurden für die Grenzfälle $h = 0$ und $h = h_S$ verwendet.

2.4.5. Spezifische Wärmen

In Abbildung 2.22 wird die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ für die von außen angelegten Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$ in Abhängigkeit von der Temperatur $T/(s(s+1))$ präsentiert. Zur besseren Unterscheidung der spezifischen Wärmen sind die Grenzfälle $h = 0$ und $h = h_S$ mit dickeren Linien dargestellt.

Ist das Feld $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, h_S$ findet man für $s = \frac{1}{2}$ keine zwei Maxima. In der Nähe des Sättigungsfeldes, bei $h = 0.95h_S, 1.05h_S$, sind zusätzliche Tieftemperatur-Maxima zu sehen. Das größere der Tieftemperatur-Maxima gehört zur Feldstärke $h = 1.05h_S$. Für $s = 1$ ist im Fall von $h = 0, h_{M(1/3)}, 0.95h_S$ eine Schulter bei tiefen Temperaturen zu sehen. Ein Tieftemperatur-Maximum gibt es bei $h = 1.05h_S$. Am Ende des 1/3-Plateaus ($h_{E(1/3)}$) sowie bei h_S ist kein zweites Maximum sichtbar.

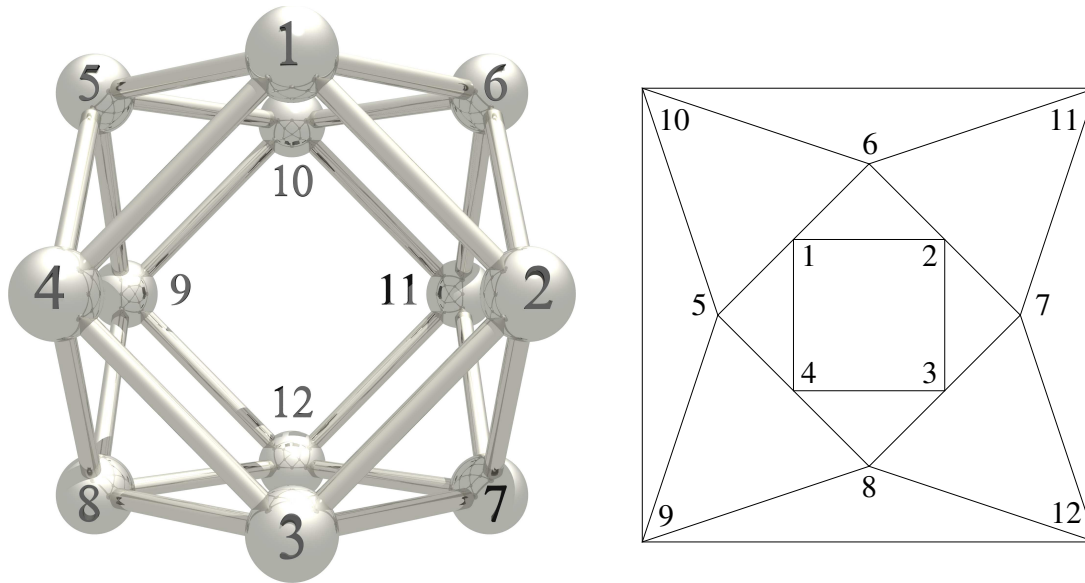
Für die beiden Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1$ ist die spezifische Wärme im Bereich $[0,1]$ über $T/(s(s+1))$ aufgetragen. Bei $s = \frac{1}{2}$ wird die spezifische Wärme in zwei Diagrammen gezeigt (Abbildung 2.22 (c)), um das Verhalten deutlich erkennen zu können. In dem kleineren Diagramm soll ein grober Eindruck von der spezifischen Wärme vermittelt werden, wohingegen das große Diagramm das Verhalten der spezifischen Wärme bei sehr kleinen Temperaturen wiedergibt. Das kleine Diagramm zeigt, dass es bei allen angelegten Feldern ein Maximum gibt, welches bei $T/(s(s+1)) > 0.2$ eingenommen wird. Der im kleinen Diagramm, bei kleinen Temperaturen, eingerahmte Bereich der spezifischen Wärme kennzeichnet den im großen Diagramm dargestellten Bereich. Es gibt bei $h = 0, h_{M(1/3)}$ ein klar erkennbares zweites Maximum. Hingegen findet man bei den anderen Feldern eine Schulter bei tiefen Temperaturen. Im Fall von $h = 0.95h_S$ ist neben der Schulter noch ein sehr kleines Maxima bei einer Temperatur $T/(s(s+1)) < 0.05$ zu sehen. Offensichtlich lässt ein von außen angelegtes Feld das Maximum, welches bei kleineren Temperaturen für $s = \frac{7}{2}$ existiert, kleiner werden.

Durch den Vergleich der Grafiken ist ersichtlich, dass sich mit abnehmenden Quantenfluktuationen ein zweites Maximum bei kleineren Temperaturen zeigt.

2.5. FRUSTRIERTE SYSTEME: DAS KUBOKTAEDER UND DAS IKOSIDODEKAEDER

Aufgrund ihrer Struktur weisen frustrierte Systeme ungewöhnliche magnetische Eigenschaften auf, wodurch sie von besonderem Interesse sind [8, 49, 69, 70]. Eine gewisse Ausnahme bildet das zuvor untersuchte Oktaeder, denn es ist ein Lieb-Mattis-Modell. In diesem Abschnitt werden das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder behandelt. Wie schon in der Einführung erwähnt, existieren Moleküle in der Form von Kuboktaedern [4] und Ikosidodekaedern [5–7], was das Studium dieser Systeme besonders motiviert. Diese Körper sind auch stark frustriert, lassen sich aber nicht mehr durch ein Lieb-Mattis-Modell beschreiben. Neben der exakten Diagonalisierung können z.B. die „density-matrix renormalization group“-Technik (DMRG) [71–73] und Takahashis modifizierte Spinwellentheorie [74] für das Ikosidodekaeder angewendet werden.

Das Kuboktaeder besteht aus acht Dreiecken, die frustrierend wirken, und sechs Quadraten. In Abbildung 2.23 ist eine dreidimensionale Abbildung und eine zweidimensionale Projektion dieses Archimedischen Körpers zu finden. Die Zahlen in Abbildung 2.23 (b) nummerieren die Spins auf den Eckpunkten. Im Unterschied zum Oktaeder teilen sich die Dreiecke des Kuboktaeders lediglich Ecken und nicht Kanten, was zu einer anderen Art von geometrischer Frustration führt. Der klassische Grundzustand ist z.B. bei Ecken-teilenden-Dreiecken stärker entartet als bei Kanten-teilenden-



(a) Dreidimensionale Darstellung.

(b) Zweidimensionale Projektion.

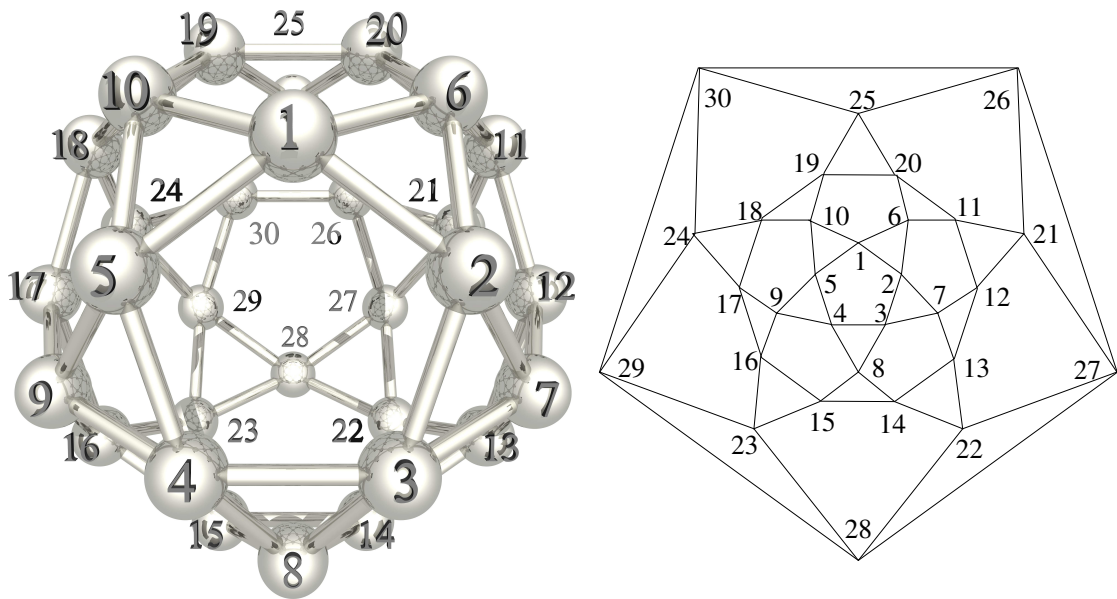
Abbildung 2.23.: Eine dreidimensionale Darstellung des Kuboktaeders in (a) sowie die zweidimensionale Projektion in (b). In (a) symbolisieren die Kugeln die Eckpunkte, an denen Spins sitzen, und die Zylinder die Bindungen. Bei der zweidimensionalen Darstellung in (b) sind die nummerierten Eckpunkte die Plätze, an denen die jeweiligen Spins sitzen. Die Bindungen sind durch Linien symbolisiert.

Dreiecken. In [69] sind schon einige Ergebnisse für das Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{2}$ vorgestellt worden.

Das bekannteste der vier in dieser Arbeit studierten Systeme ist sicherlich das Ikosidodekaeder. In Abbildung 2.24 ist eine dreidimensionale Darstellung sowie eine zweidimensionale Projektion des Ikosidodekaeders zu sehen. Es besteht aus zwölf Fünfecken, zwanzig Dreiecken und besitzt dreißig Spins. Wie auch beim Kuboktaeder teilen sich die Dreiecke ihre Ecken. Ecken-teilende-Dreiecke sind ein charakteristisches Merkmal der Struktur des Kuboktaeders und des Ikosidodekaeders und auch des zweidimensionalen Kagomé-Gitters, das in Abbildung 4.1 dargestellt ist. Die dreidimensionalen Koordinaten des Ikosidodekaeders sind in Tabelle 2.8 den Nummern der Spins aus Abbildung 2.24 zugeordnet. Setzt man für τ den goldenen Schnitt $(1 + \sqrt{5})/2$ ein, so ist der Abstand zwischen nächsten Nachbarn eins.

2.5.1. Spektren

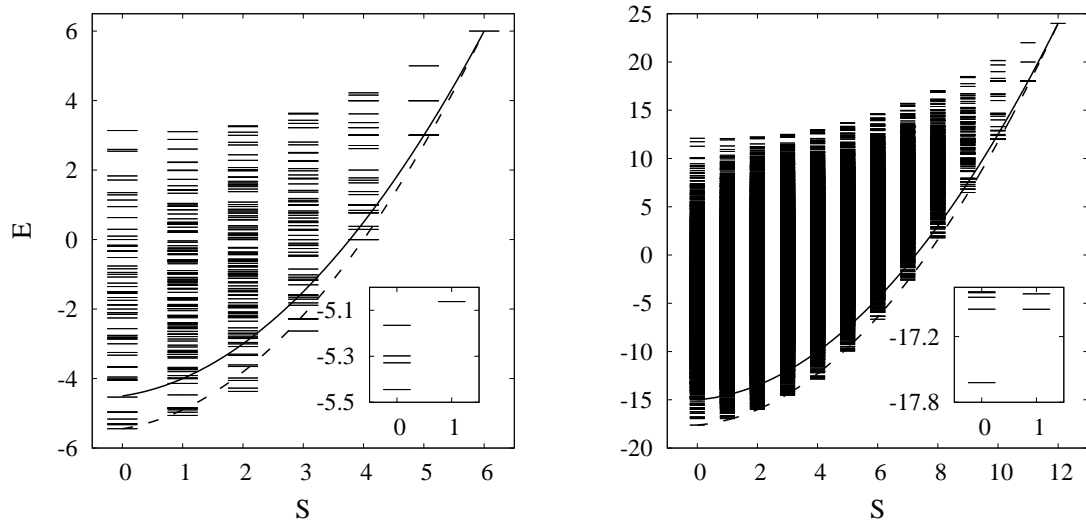
Die Spektren des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ sind in Abbildung 2.25 in Abhängigkeit von S dargestellt. Das Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$ besitzt 4096 Zustände. Bei der Quantenzahl $s = 1$ charakterisieren 531441 Zustände das Kuboktaeder. Wie auch beim Ring und Quadratgitter sind die Energien des Kuboktaeders und des Ikosidodekaeders



(a) Dreidimensionale Darstellung.

(b) Zweidimensionale Projektion.

Abbildung 2.24.: Eine dreidimensionale Darstellung des Ikosidodekaeders in (a) sowie die zweidimensionale Projektion in (b). In (a) symbolisieren die Kugeln die Eckpunkte, an denen Spins sitzen, und die Zylinder die Bindungen. Bei der zweidimensionalen Darstellung in (b) sind die nummerierten Eckpunkte die Plätze, an denen die jeweiligen Spins sitzen. Die Bindungen sind durch Linien symbolisiert.



(a) Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$.

(b) Kuboktaeder mit $s = 1$.

Abbildung 2.25.: Das Spektrum des Kuboktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von S . Die Ergebnisse von $E_{S,\min}$ ((2.6)) sind durch eine gestrichelte und die Ergebnisse von $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ ((2.7)) durch eine durchgezogene Linie angegeben.

Tabelle 2.8.: Nummer der Spins (Nr.) und die dazugehörigen Koordinaten (x, y, z) des Ikosidodekaeders in drei Dimensionen. Mit $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ ist der Abstand zwischen nächsten Nachbarn eins.

| Nr. | x, y, z in 3D | Nr. | x, y, z in 3D |
|-----|-------------------------------------|-----|--------------------------------------|
| 1: | 0, τ , 0 | 16: | $(1 + \tau)/2$, $-1/2$, $\tau/2$ |
| 2: | $-\tau/2$, $(1 + \tau)/2$, $1/2$ | 17: | τ , 0, 0 |
| 3: | $-1/2$, $\tau/2$, $(1 + \tau)/2$ | 18: | $(1 + \tau)/2$, $1/2$, $-\tau/2$ |
| 4: | $1/2$, $\tau/2$, $(1 + \tau)/2$ | 19: | $1/2$, $\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$ |
| 5: | $\tau/2$, $(1 + \tau)/2$, $1/2$ | 20: | $-1/2$, $\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$ |
| 6: | $-\tau/2$, $(1 + \tau)/2$, $-1/2$ | 21: | $-(1 + \tau)/2$, $-1/2$, $-\tau/2$ |
| 7: | $-(1 + \tau)/2$, $1/2$, $\tau/2$ | 22: | $-\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$, $1/2$ |
| 8: | 0, 0, τ | 23: | $\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$, $1/2$ |
| 9: | $(1 + \tau)/2$, $1/2$, $\tau/2$ | 24: | $(1 + \tau)/2$, $-1/2$, $-\tau/2$ |
| 10: | $\tau/2$, $(1 + \tau)/2$, $-1/2$ | 25: | 0, 0, $-\tau$ |
| 11: | $-(1 + \tau)/2$, $1/2$, $-\tau/2$ | 26: | $-1/2$, $-\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$ |
| 12: | $-\tau$, 0, 0 | 27: | $-\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$, $-1/2$ |
| 13: | $-(1 + \tau)/2$, $-1/2$, $\tau/2$ | 28: | 0, $-\tau$, 0 |
| 14: | $-1/2$, $-\tau/2$, $(1 + \tau)/2$ | 29: | $\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$, $-1/2$ |
| 15: | $1/2$, $-\tau/2$, $(1 + \tau)/2$ | 30: | $1/2$, $-\tau/2$, $-(1 + \tau)/2$ |

nicht ganzzahlig, da sie ebenso keine Lieb-Mattis-Systeme sind. Die Anregungen innerhalb der S -Räume sind weniger klar von der jeweilig niedrigsten Energie separiert, als bei den zuvor betrachteten unfrustrierten Systemen und dem Oktaeder. Des Weiteren sind in den Diagrammen die Rotationsbänder (2.6) und (2.7) zu finden. Beide Rotationsbänder weisen Abweichungen von den niedrigsten Energien der S -Räume auf. Die Abweichungen (Gleichung (2.9) und Gleichung (2.10)) sind in Tabelle 2.9 dokumentiert. Wie man dieser Tabelle entnehmen kann, sind die Abweichungen bei $s = 1$ geringer als bei $s = \frac{1}{2}$. Die Abbildung der Rotationsbänder macht deutlich, dass die Abweichungen des Rotationsbandes (2.6) von den niedrigsten Energien besonders bei kleinen S größer sind als die des Rotationsbandes (2.7).

In den kleinen Diagrammen von Abbildung 2.25 sind die niedrigsten Energien für $S = 0, 1$ dargestellt. Man kann erkennen, dass im Falle von $s = \frac{1}{2}$ drei Energien innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke existieren. Der Grundzustand, der ein Singulett ist, und die erste $S = 0$ -Anregung sind nicht entartet. Die zweite $S = 0$ -Anregung ist zweifach und die dritte dreifach entartet. Dementsprechend liegen sechs Singuletts innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke. Im Fall von $s = 1$ gibt es kein Singulett innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke. Die erste Singulett-Anregung liegt nur geringfügig höher als das niedrigste Triplett. In Tabelle 2.9 ist die Anzahl der Singuletts N_{ST} , die unterhalb der niedrigsten Triplets liegen, aufgelistet. Neben den Werten für $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ sind in der Tabelle auch die entsprechenden Werte für $s = \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$ angege-

Tabelle 2.9.: Die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ (Gleichung (2.9)) und $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.10)), der in diesem Kapitel studierten Systeme, die Anzahl der Singulettts N_{ST} , die unterhalb der ersten Triplett-Anregung liegen, sowie der Quotient $Q = (E_{\text{FM}} - \max\{E(S=0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}})$ für verschiedene Quantenzahlen s .

| Systeme | s | $\Delta_{S,\min}$ | $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ | N_{ST} | Q |
|-----------------|---------------|-------------------|-----------------------------------|-----------------|------|
| LMS | $\frac{1}{2}$ | 0 | 0 | 1 | 0.42 |
| | 1 | 0 | 0 | 1 | 0.46 |
| Ring | $\frac{1}{2}$ | 0.0570295 | 0.6024672 | 1 | 0.04 |
| | 1 | 0.0264180 | 0.2623382 | 1 | 0.05 |
| | $\frac{3}{2}$ | 0.0142237 | 0.1624267 | 1 | |
| | 2 | 0.0097414 | 0.1173107 | 1 | |
| | $\frac{5}{2}$ | 0.0073390 | 0.0916945 | 1 | |
| Quadratgitter | $\frac{1}{2}$ | 0.0308694 | 0.3556488 | 1 | |
| | 1 | 0 | 0 | 1 | 0.50 |
| Oktaeder | $\frac{1}{2}$ | 0 | 0 | 1 | 0.57 |
| | 1 | 0 | 0 | 1 | 0.63 |
| Kuboktaeder | $\frac{7}{2}$ | 0 | 0 | 1 | 0.63 |
| | $\frac{1}{2}$ | 0.0172176 | 0.1506751 | 7 | 0.36 |
| | 1 | 0.0014264 | 0.0863046 | 1 | 0.40 |
| | $\frac{3}{2}$ | 0.0014997 | 0.0569026 | 3 | |
| | 2 | 0.0006408 | 0.0434074 | 3 | |
| Ikosidodekaeder | $\frac{5}{2}$ | 0.0007138 | 0.0348509 | 6 | |
| | $\frac{1}{2}$ | 0.0176080 | 0.7004390 | >20 | |

ben. Auch wenn die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ bei $s = \frac{3}{2}$ und $s = \frac{5}{2}$ kleiner sind als bei den nächst kleineren Quantenzahlen ($s = 1$ und $s = 2$), ist der Trend zu erkennen, dass die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$, wie auch die Abweichungen $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$, mit abnehmenden Quantenfluktuationen verschwinden.

In Abbildung 2.26 werden die niedrigsten Energien eines jeden S -Raumes des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ gezeigt. Es sind in dieser Abbildung auch die Rotationsbänder $E_{S,\min}$ und $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ zu finden. Die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ und $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ sind ebenfalls in Tabelle 2.9 aufgeführt. Während $\Delta_{S,\min}$ mit dem Kuboktaeder vergleichbar ist, ist der Wert für die Abweichung $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ mehr als das 4.5-fache größer als beim Kuboktaeder. Die Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ des Rings mit $s = \frac{1}{2}$ sind mehr als das Dreifache größer als beim Kuboktaeder und beim Ikosidodekaeder. Der Vergleich der Abweichungen $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ zeigt, dass diese Abweichung des Rings nahezu viermal größer als beim Kuboktaeder und kleiner als die des Ikosidodekaeders ist. Aufgrund der kleineren Koordinationszahl des Rings ($z_1 = 2$) ist der Einfluss der Quantenfluktuationen beim Ring stärker als beim Kuboktaeder mit $z_1 = 4$. Das Quadratgitter kann zum Vergleich mit dem Ikosidodekaeder herangezogen werden. Es besitzt ebenso vier nächste Nachbarn und eine vergleichbare Zahl von Spins N . Die Abweichung $\Delta_{S,\min}$ des Ikosidodekaeders beträgt 57% von der des Quadratgitters. $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ ist hingegen fast doppelt so groß wie $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$.

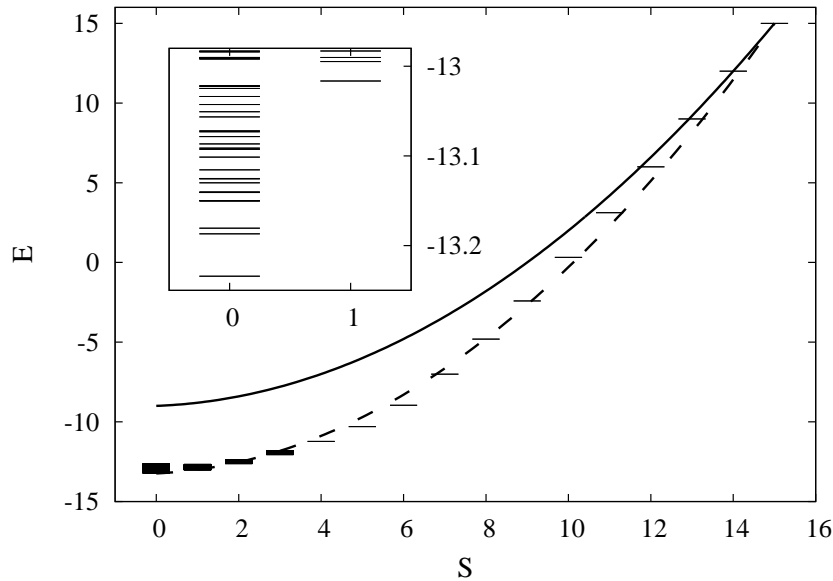


Abbildung 2.26.: Die niedrigsten Energien des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ in Abhängigkeit von $S = 0, 1, \dots, 15$. Die Ergebnisse von $E_{S,\min}$ ((2.6)) sind durch eine gestrichelte und die Ergebnisse von $E_{S,\min}^{\text{approx}}$ ((2.7)) durch eine durchgezogene Linie angegeben. In dem kleinen Diagramm sind die Energien innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke, d.h. die niedrigsten mit $S = 0, 1$ zu sehen.

des Quadratgitters.

Im Gegensatz zum Kuboktaeder sind die niedrigsten Energien eines jeden S -Raums des Rings deutlich von den ersten Anregungen separiert. Ein weiterer Unterschied des Rings zum Kuboktaeder und zum Oktaeder ist, dass die höchsten Energien eines jeden S -Raums verhältnismäßig nahe am ferromagnetischen Grundzustand sind. Der Quotient $Q = (E_{\text{FM}} - \max\{E(S=0)\}) / (E_{\text{FM}} - E_{\text{G}})$ in Tabelle 2.9 verdeutlicht diese Eigenschaft in Zahlenwerten. In dem kleinen Diagramm von Abbildung 2.26, welches eine Vergrößerung ist, sind die Energien innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke zu finden. Aus diesem Diagramm kann man erkennen, dass es mindestens zwanzig Singuletts unterhalb der ersten Triplett-Energie gibt. Die große Anzahl der Singuletts innerhalb der Singulett-Triplett-Lücke kann als Hinweis auf ein stark ausgeprägtes zusätzliches Tieftemperatur-Maximum in der spezifischen Wärme gedeutet werden.

Eine vollständige Diagonalisierung konnte beim Ikosidodekaeder mit $s = \frac{1}{2}$ bis $S^z = 9$ durchgeführt werden. Die Anzahl der Elemente der größten diagonalisierten Matrix ist in diesem M -Raum 74737.

2.5.2. Spektralkoeffizienten

Ein deutlicher Unterschied zwischen den beiden frustrierten Systemen, die keine Lieb-Mattis-Systeme sind (das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder), und dem unfrustrierten Ring zeigt sich beim Vergleich der Spektralkoeffizienten. Während bei den

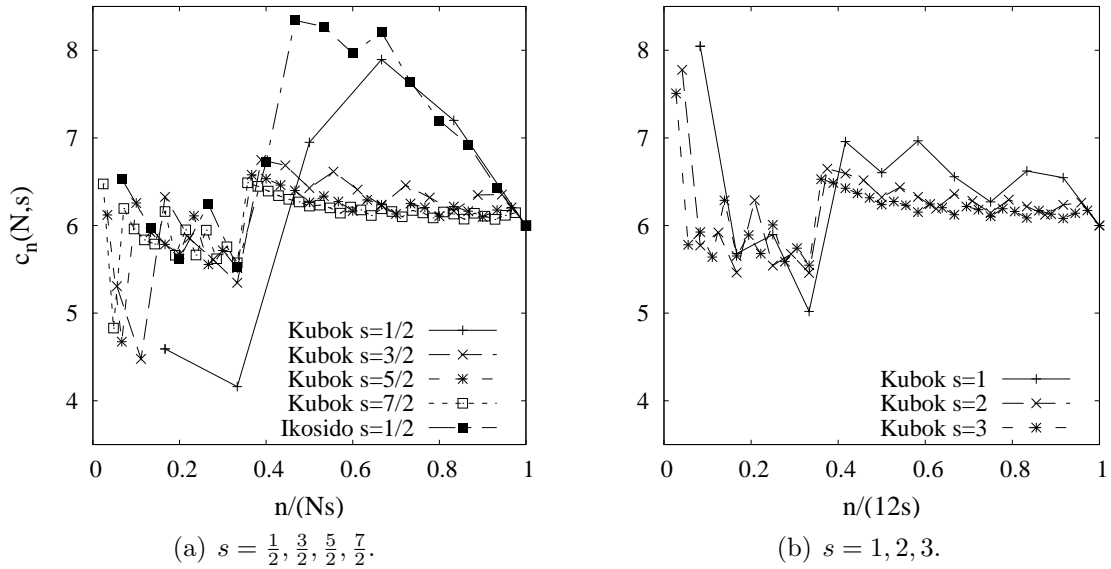


Abbildung 2.27.: Spektralkoeffizienten $c_n(N, s)$ des Kuboktaeders ($c_n(12, s)$) für die halbzahligen Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$ in (a) und die ganzzahligen $s = 1, 2, 3$ in (b) sowie des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ ($c_n(30, \frac{1}{2})$) ebenfalls in (a) in Abhängigkeit von $n/(Ns)$. Mit den Linien werden die Datenpunkte verbunden.

beiden frustrierten Systemen die Spektralkoeffizienten um den Wert sechs, der bei $n/(Ns) = 1$ eingenommen wird, zu „pendeln“ scheinen, ist beim Ring ein Abfall der Koeffizienten mit zunehmendem n zu beobachten. Das „Pendeln“ wird sicherlich durch die Frustration bei diesen Systemen hervorgerufen.

Im Gegensatz zum Oktaeder nehmen die Spektralkoeffizienten des Kuboktaeders ($N = 12$) sowie des Ikosidodekaeders ($N = 30$), die in Abbildung 2.27 dargestellt sind, lediglich bei $n/(Ns) = 1$ den Wert sechs an. Die Linien in diesen Diagrammen verbinden die Punkte zur besseren Unterscheidung der Quantenzahlen und Systeme. Beim Vergleich von Abbildung 2.27 (a) und (b) fällt auf, dass die ganzzahligen Spins bei $n = 1$ Werte annehmen, die größer als 7.5 sind, wohingegen bei halbzahligem Spins die entsprechenden $c_n(12, s)$ s kleiner als 6.6 sind.

Betrachtet man die Abweichungen der Spektralkoeffizienten von sechs, so findet man, dass die Abweichungen mit zunehmendem s kleiner werden. Das stimmt mit dem Trend der Abweichungen $\Delta_{S,\min}$ (Gleichung (2.9)) und $\Delta_{S,\min}^{\text{approx}}$ (Gleichung (2.10)) überein. In der Umgebung von $n/(Ns) \approx 0.7$ unterscheiden sich die Spektralkoeffizienten des extremen Quantenfalls relativ stark von den anderen Spektralkoeffizienten (mit $s > \frac{1}{2}$).

Die Spektralkoeffizienten des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ verhalten sich ähnlich wie die des Kuboktaeders.

Insgesamt kann man zu der Schlussfolgerung kommen, dass die Rotationsbandbeschreibung nicht geeignet für frustrierte Spinsysteme mit starken Quantenfluktuationen ist.

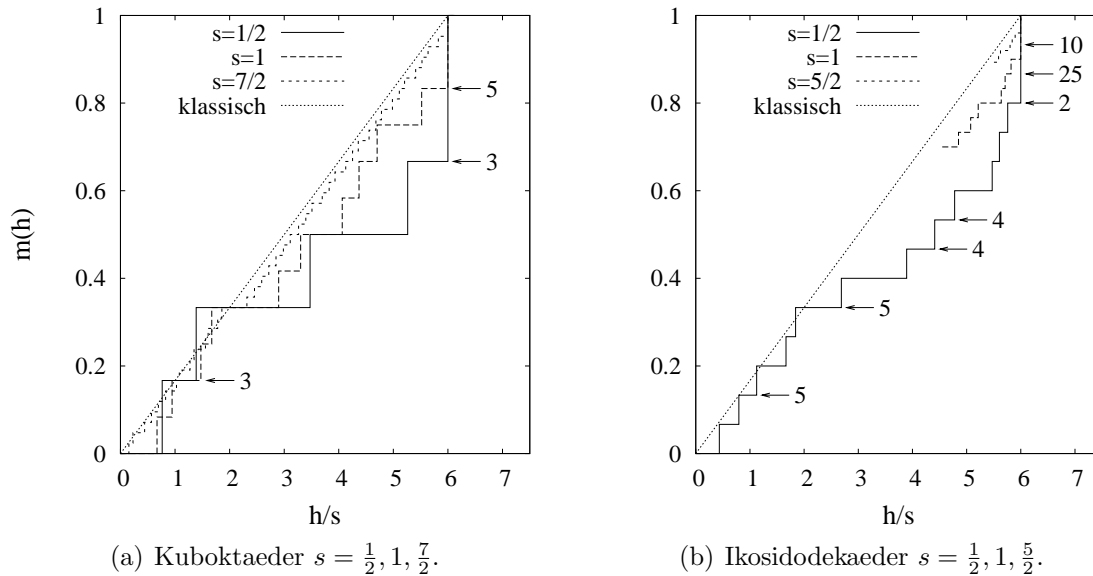


Abbildung 2.28.: Die Magnetisierungen (a) des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$ und $s = \frac{7}{2}$ und (b) des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$, $s = \frac{5}{2}$ bei $T = 0$ in Abhängigkeit von h/s . Die Geraden sind die klassischen Magnetisierungen bei $T = 0$. Die Zahlen geben für $s = \frac{1}{2}$ die Entartung der niedrigsten Energien bei der entsprechenden Feldstärke an.

2.5.3. Grundzustandsmagnetisierungen

In diesem Abschnitt werden die Grundzustandsmagnetisierungen des Kuboktaeders für $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$, $s = \frac{7}{2}$ und des Ikosidodekaeders für $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$, $s = \frac{5}{2}$ studiert. Die Magnetisierungen werden in Abbildung 2.28 (a) und (b) in Abhängigkeit von h/s gezeigt. In diesen Abbildungen sind auch die Magnetisierungen des klassischen Modells für das Kuboktaeder und das Ikosidodekaeder bei $T = 0$ zu finden. Die Felder h_n , bei denen die Magnetisierungen springen, sind zusammen mit den zugehörigen Magnetisierungen in Tabelle 2.10 und Tabelle 2.11 aufgelistet.

Die Treppenstufen der Grundzustandsmagnetisierung des Kuboktaeders sind unterschiedlich. Bemerkenswert ist der Sprung zur vollen Magnetisierung, welcher die doppelte Höhe der anderen Sprünge besitzt. Der besonders große Sprung ist auf die Existenz von so genannten lokalisierten Magnonen in frustrierten Systemen zurückzuführen. Die lokalisierten Magnonen sitzen bei diesem System auf den Quadraten [49,75,76]. Neben dem Sprung zur vollen Magnetisierung sind die großen Plateaus bei $m = 1/3$ und $\frac{1}{2}$ auffällig. Nach [76,77] wird die Größe der Plateaus, wie auch bei Gittern, durch das Zusammenspiel von Frustration und Quantenfluktuationen beeinflusst. Unterhalb des $1/3$ -Plateaus gibt es Felder, bei denen die Magnetisierung des Quantenspinsystems größere Werte annimmt als die klassische Magnetisierung ($s \rightarrow \infty$). Bei den zuvor betrachteten unfrustrierten Systemen bleibt die Grundzustandsmagnetisierung immer kleiner als die klassische Magnetisierung und bei den Lieb-Mattis-Systemen

Tabelle 2.10.: Werte der Feldstärke h_n , bei denen die Magnetisierungen des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{7}{2}$ springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen $m(h_n)$.

| $s = \frac{1}{2}$ | | $s = 1$ | | $s = \frac{7}{2}$ | |
|-------------------|----------|-----------|----------|-------------------|----------|
| h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ |
| 0.3826683 | 0.1667 | 0.6705100 | 0.0833 | 0.5395270 | 0.0238 |
| 0.6935330 | 0.3333 | 0.9464402 | 0.1667 | 0.8049363 | 0.0476 |
| 1.7373199 | 0.5000 | 1.4738738 | 0.2500 | 1.5485417 | 0.0714 |
| 2.6313538 | 0.6667 | 1.6730942 | 0.3333 | 1.9870215 | 0.0952 |
| 3.0000000 | 0.8333 | 2.8993262 | 0.4167 | 2.4316340 | 0.1190 |
| 3.0000000 | 1.0000 | 3.3013322 | 0.5000 | 2.8942033 | 0.1429 |
| | | 4.0637438 | 0.5833 | 3.5932497 | 0.1667 |
| | | 4.3711482 | 0.6667 | 3.7738059 | 0.1905 |
| | | 4.7026142 | 0.7500 | 4.4629296 | 0.2143 |
| | | 5.5187834 | 0.8333 | 4.7193543 | 0.2381 |
| | | 6.0000000 | 0.9167 | 5.4515547 | 0.2619 |
| | | 6.0000000 | 1.0000 | 5.6203900 | 0.2857 |
| | | | | 6.23696389 | 0.3095 |
| | | | | 6.50376561 | 0.3333 |
| | | | | 8.10946353 | 0.3571 |
| | | | | 8.59628929 | 0.3810 |
| | | | | 9.05703769 | 0.4048 |
| | | | | 9.51203852 | 0.4286 |
| | | | | 9.97461418 | 0.4524 |
| | | | | 10.4480561 | 0.4762 |
| | | | | 10.8883927 | 0.5000 |
| | | | | 11.4257819 | 0.5238 |
| | | | | \vdots | \vdots |
| | | | | 20.3868934 | 0.9524 |
| | | | | 21.0000000 | 0.9762 |
| | | | | 21.0000000 | 1.0000 |

wird an den Sprungstellen die klassische Magnetisierung eingenommen. Die Quanteneffekte, die mit den Abweichungen von der dargestellten Gerade, die die Sättigungsmagnetisierung bei $h_s/s = 6$ erreicht, in Verbindung gebracht werden können, nehmen mit zunehmenden s deutlich ab. Jedoch sind sie, auch wenn sie weniger ausgeprägt sind, bei $s = \frac{7}{2}$ noch vorhanden.

In Abbildung 2.28 (b) ist die komplette Grundzustandsmagnetisierung des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ und die Grundzustandsmagnetisierung bei hohen Feldern für $s = 1, \frac{5}{2}$ in Abhängigkeit von h/s dargestellt. Wie auch beim Kuboktaeder besitzt das Ikosidodekaeder einen Sprung zur vollen Magnetisierung, der dreimal so hoch ist wie

Tabelle 2.11.: Werte der Feldstärke h_n , bei denen die Magnetisierungen des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{2}$ springen, sowie die zugehörigen Magnetisierungen $m(h_n)$.

| $s = \frac{1}{2}$ | | $s = 1$ | | $s = \frac{5}{2}$ | |
|-------------------|----------|-----------|----------|-------------------|----------|
| h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ | h_n | $m(h_n)$ |
| 0.2178158 | 0.0667 | 4.5493059 | 0.7000 | 13.7615783 | 0.8933 |
| 0.3977299 | 0.1333 | 4.8496615 | 0.7333 | 13.9731135 | 0.9067 |
| 0.5621627 | 0.2000 | 5.0745067 | 0.7667 | 14.0641171 | 0.9200 |
| 0.8326744 | 0.2667 | 5.2140892 | 0.8000 | 14.5058037 | 0.9333 |
| 0.9210434 | 0.3333 | 5.6383986 | 0.8333 | 14.6031284 | 0.9467 |
| 1.3441242 | 0.4000 | 5.7103601 | 0.8667 | 14.7401440 | 0.9600 |
| 1.9464154 | 0.4667 | 5.8198410 | 0.9000 | 15.0000000 | 0.9733 |
| 2.2051836 | 0.5333 | 6.0000000 | 0.9333 | 15.0000000 | 0.9867 |
| 2.3894696 | 0.6000 | 6.0000000 | 0.9667 | 15.0000000 | 1.0000 |
| 2.7360532 | 0.6667 | 6.0000000 | 1.0000 | | |
| 2.8023319 | 0.7333 | | | | |
| 2.8792115 | 0.8000 | | | | |
| 3.0000000 | 0.8667 | | | | |
| 3.0000000 | 0.9333 | | | | |
| 3.0000000 | 1.0000 | | | | |

die anderen Sprünge. Der letzte besonders große Sprung kann auf die Existenz von lokalisierten Magnonen, welche auf Zehneckern zu finden sind [70], zurückgeführt werden. Im Unterschied zum Kuboktaeder hat das Ikosidodekaeder drei besonders große Plateaus bei $m = 1/3, 2/5, 3/5$. Für $s = 1$ und $s = \frac{5}{2}$ werden die Sprünge wieder kleiner, der charakteristische Sprung zur vollen Magnetisierung ist jedoch weiterhin zu beobachten.

Die Zahlen in Abbildung 2.28 (a) und (b) beziehen sich auf die Magnetisierungskurven für $s = \frac{1}{2}$ und geben die Entartung der niedrigsten Energien bei der entsprechenden Feldstärke an. Sind keine Zahlen bei den Plateaus angegeben, so liegt keine Entartung vor. Bei den Sprüngen zur vollen Magnetisierung weisen die Pfeile auf die Werte von $m(h)$, bei denen man in Lieb-Mattis-Systemen und den unfrustrierten Ringen weitere Plateaus findet.

2.5.4. Integrierte Zustandsdichte

Die integrierte Zustandsdichte n des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ ist in Abbildung 2.29 dargestellt. Wie man Tabelle 2.12 entnehmen kann, besitzen die Grundzustandsenergien für $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ bei den gezeigten Feldern dieselbe Entartung. Im Falle der ersten Anregung treten Unterschiede in den Entartungen bei $h = 0$ und $h = 0.95h_s$ auf. Die Entartung der niedrigsten Anregungen ist ohne äußeres Feld bei

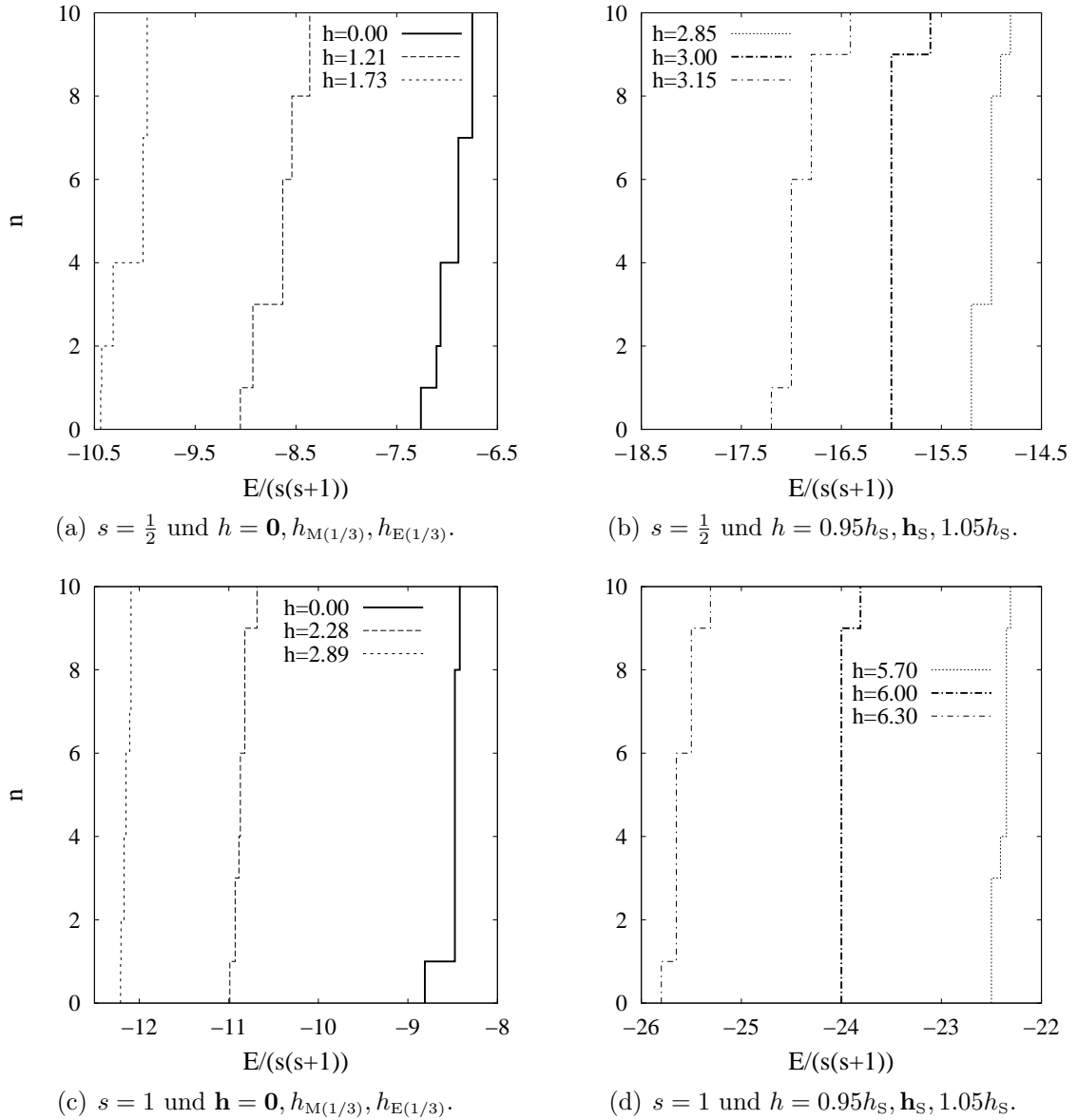


Abbildung 2.29.: Integrierte Zustandsdichte $n(E/(s(s+1)))$ des Kuboktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$, (b) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$, (c) $s = 1$ bei $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ und (d) $s = \frac{1}{2}$ bei $h = 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$. Im Falle von $h = 0, h_S$ wurden dickere Linien verwendet, um diese Grenzfälle hervorzuheben.

$s = 1$ größer als bei $s = \frac{1}{2}$. Bei $h_{M(1/3)}$ sind, im Fall von $s = 1$, die ersten Anregungen weniger entartet als bei $h = 0$. Am Sättigungsfeld bei $h = h_S$ ist der Grundzustand am stärksten entartet, nämlich neunfach. Auch im Vergleich mit den unfrustrierten Systemen und dem Oktaeder, bei denen der Grundzustand am Sättigungsfeld zweifach und dreifach entartet ist, ist die neunfache Entartung des Kuboktaeders um ein Vielfaches

Tabelle 2.12.: Entartung des Grundzustandes und der ersten Anregung des Kuboktaeders für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}, 1$ und die Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_S, h_S, 1.05h_S$.

| s | | $h = 0$ | $h_{M(1/3)}$ | $h_{E(1/3)}$ | $0.95h_S$ | h_S | $1.05h_S$ |
|---------------|----------------|---------|--------------|--------------|-----------|-------|-----------|
| $\frac{1}{2}$ | Grundzustand | 1 | 1 | 1 | 3 | 9 | 1 |
| | erste Anregung | 1 | 2 | 1 | 5 | 3 | 5 |
| 1 | Grundzustand | 1 | 1 | 1 | 3 | 9 | 1 |
| | erste Anregung | 6 | 2 | 1 | 1 | 3 | 5 |

größer. Als Ursache für die starken Entartungen des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ bei $h = h_S$ können die lokalisierten Magnonen angesehen werden.

Die Entartungen des Grundzustandes und der niedrigsten Anregungen sind bei $h = 1.05h_S$ für $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ identisch.

2.5.5. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen

Beim Kuboktaeder gibt es vier unterschiedliche Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Entsprechend der Nummerierung von Abbildung 2.23 werden nun die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2 \rangle$, der zwei übernächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 \rangle$ und $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 \rangle$ sowie der dritt-nächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{12} \rangle$ vorgestellt. Für das Kuboktaeder wurden die Grundzustands-Spin-Spin-Korrelationsfunktionen für $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, \frac{7}{2}$ berechnet. Sie sind mit $1/(s(s+1))$ multipliziert in Abhängigkeit von $1/s$ in Abbildung 2.30 dargestellt. Interessanterweise unterscheidet sich der extreme Quantenfall, außer im Fall der nächsten Nachbarn, von allen anderen Quantenzahlen s , was das Vorzeichen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen betrifft. Außer bei den nächsten Nachbarn, ist ein klarer Unterschied zwischen halbzahligen und ganzzahligen Spins ersichtlich. Der Unterschied kann darauf zurück geführt werden, dass drei halbzahlige Spins auf einem Dreieck nicht den Gesamtspin Null haben können. Das ist aber im Fall von ganzzahligen Spins möglich. Die Extrapolation von $\langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle / (s(s+1))$ strebt gegen den arithmetischen Mittelwert der acht komplanaren (zweidimensionalen) klassischen Grundzustände. Nach [63] existieren beim Kuboktaeder nicht nur komplanare, sondern auch dreidimensionale klassische Grundzustände, mit der gleichen Energie. Die Spin-Einstellungen des Kuboktaeders im klassischen Modell sind in Abbildung 2.31 gezeigt. Mit den Ellipsen in dieser Abbildung werden die unendlich vielen Möglichkeiten der Spin-Einstellungen auf Kreisen symbolisiert, bei denen eine 120° Struktur beibehalten wird. Spins mit gleichen Ellipsen (durchgezogen oder gestrichelt) sind zueinander in einem Winkel von 120° ausgerichtet, wohingegen zwischen Spins mit unterschiedlichen Ellipsen verschiedene Winkel eingenommen werden können. Für die große Entartung der klassischen Energien sind die Ecken-teilenden-Dreiecke verantwortlich. Beim Oktaeder, das nur aus Kanten-teilenden-Dreiecken besteht, existieren keine dreidimensionalen Zustände, woraus eine geringere Entartung resultiert. Da Quantenfluktuationen

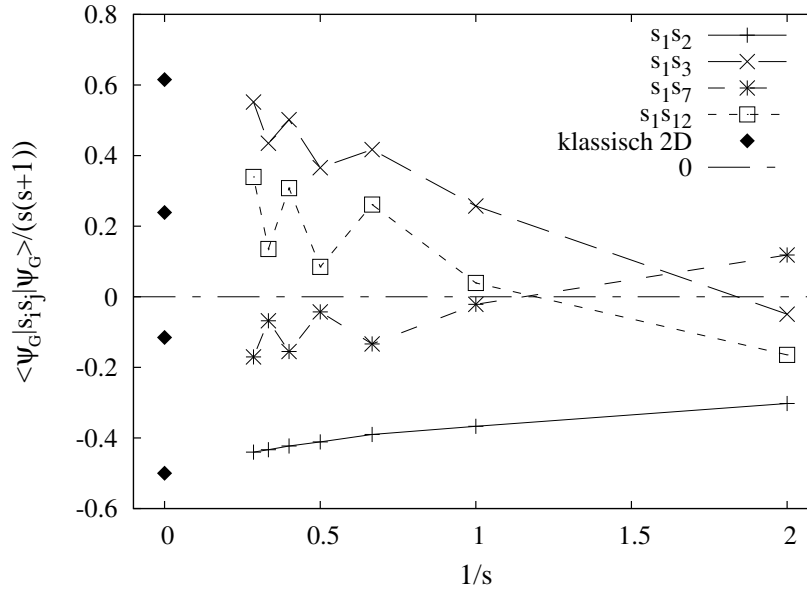


Abbildung 2.30.: Grundzustand-Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ des Kuboktaeders in Abhängigkeit von $1/s$ für $s = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{7}{2}$. Zum Vergleich sind auch die klassischen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen (klassisch 2D bei $1/s = 0$, d.h. für $s \rightarrow \infty$) der komplanaren Zustände als Rauten dargestellt. Die Linien verbinden lediglich die Datenpunkte.

komplanare Zustände favorisieren, sind nur die zweidimensionalen klassischen Zustände in Abbildung 2.30 berücksichtigt.

In Abbildung 2.32 kann die Temperatur-Abhängigkeit der vier Spin-Spin-Korrelationsfunktionen studiert werden. Offensichtlich schwächen die thermischen Fluktuationen erwartungsgemäß die magnetische Ordnung. Der Absolutwert aller Spin-Spin-Korrelationsfunktionen nimmt mit zunehmender Temperatur ab. Bemerkenswert ist jedoch, dass die thermischen Fluktuationen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen den Abständen der Spins entsprechend ordnen. Ab ungefähr $T/(s(s+1)) = 2$ dominieren nach Abbildung 2.32 die Abstände die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Bei kleinen Temperaturen spielen die Abstände der Spins eine untergeordnetere Rolle, außer im Fall der nächsten Nachbarn, die am stärksten korreliert sind. Im extremen Quantenfall ändert sich das Vorzeichen der Korrelation der übernächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 \rangle$, wobei der Absolutwert für $T \approx 0.35$ am größten ist. Wie auch der Ring mit $s = 1$ weist also auch das Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$ einen sogenannten „order from disorder“-Effekt auf. Ist $s = 1$, gibt es hingegen zwei Vorzeichenwechsel, bei den übernächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 \rangle$ und den dritt-nächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{12} \rangle$. Auch hier kann der „order from disorder“-Effekt beobachtet werden. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sind was den Absolutwert betrifft bei $T = 0.76$ und $T = 0.6$ maximal. Schon ab ungefähr $T/(s(s+1)) = 0.25$ sind die dritt-nächsten Spin-Spin-Korrelationsfunktionen wie die nächsten Spin-Spin-Korrelationsfunktionen antiferromagnetisch und die übernächsten Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ferromagnetisch ausgerichtet. Der Vergleich mit den

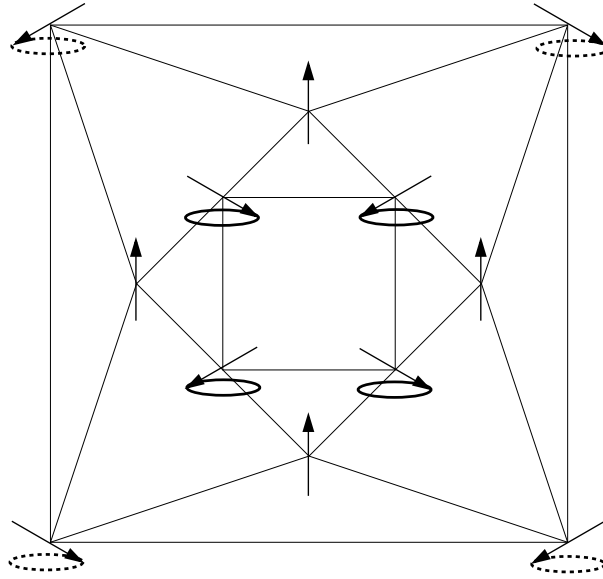


Abbildung 2.31.: Die Einstellung der Spins des Kuboktaeders im klassischen Modell. Die Ellipsen symbolisieren die unendlich vielen Einstellungsmöglichkeiten in drei Dimensionen.

unfrustrierten Systemen in 2.4.4 führt zu dem Schluss, dass die Vorzeichenwechsel der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen Frustrationseffekte sind. Analog zu den unfrustrierten Systemen sind bei hohen Temperaturen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen den Abständen entsprechend antiferromagnetisch und ferromagnetisch. Die thermischen Fluktuationen schwächen demnach den Einfluss der Frustration.

Bei der gemeinsamen Darstellung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders für die Quantenzahlen $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ in Abbildung 2.32 kann man sehen, dass die Unterschiede bei großen Temperaturen verschwinden. Im extremen Quantenfall sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn bei kleinen Temperaturen geringer als bei $s = 1$. Im unfrustrierten Ring ist dies umgekehrt. Bei zunehmender Temperatur, nehmen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn für $s = \frac{1}{2}$ beim Kuboktaeder weniger ab als bei $s = 1$, was wiederum beim unfrustrierten Ring nicht der Fall ist. Sie sind bei $T/(s(s+1)) = 2$ für $s = \frac{1}{2}$ nicht so stark korreliert wie für $s = 1$.

Es gibt Indizien dafür, dass die Quantenfluktuationen der Schwächung der magnetischen Ordnung durch die thermischen Fluktuationen entgegen wirken, wie beim Oktaeder. Zum einen sind das die stärkeren Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn im extremen Quantenfall und zum anderen der bei $s = \frac{1}{2}$ geringfügig später einsetzende starke Abfall der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen.

Die Grundzustands-Korrelationen des Ikosidodekaeders sind bei $s = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned} \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2 | \psi_G \rangle &= -0.22057, \quad \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 | \psi_G \rangle = -0.00026, \quad \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 | \psi_G \rangle = 0.05915, \\ \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_8 | \psi_G \rangle &= 0.00011, \quad \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{13} | \psi_G \rangle = -0.03609, \quad \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{14} | \psi_G \rangle = -0.00184, \\ \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{22} | \psi_G \rangle &= 0.02097 \quad \text{und} \quad \langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{28} | \psi_G \rangle = -0.03592. \end{aligned}$$

Aufgrund der Frustration

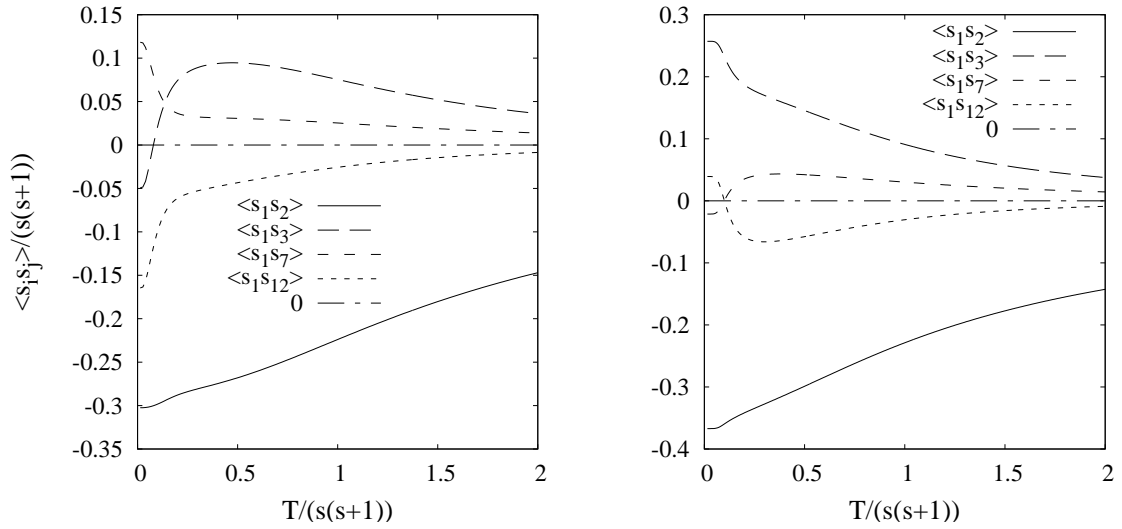
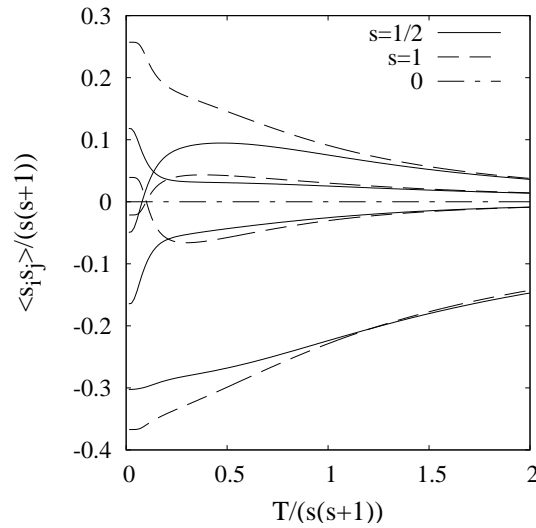
(a) Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$.(b) Kuboktaeder mit $s = 1$.(c) Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}, 1$.

Abbildung 2.32.: Die vier Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ (a) mit $s = \frac{1}{2}$ (b) mit $s = 1$ und (c) $s = \frac{1}{2}$ im Vergleich mit $s = 1$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Zur Orientierung wurde auch eine Linie bei Null dargestellt.

und Quantenfluktuationen sind alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen schwach, bis auf die der nächsten Nachbarn. Die Schwächung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen mit dem Abstand ist in Abbildung 2.33 für das Ikosidodekaeder sowie das unfrustrierte Quadratgitter mit $N = 32$ zu finden. In dieser Darstellung wird der Betrag der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von den euklidischen und den Manhattan-Abständen gezeigt. Die Manhattan-Abstände sind dabei gleich der An-

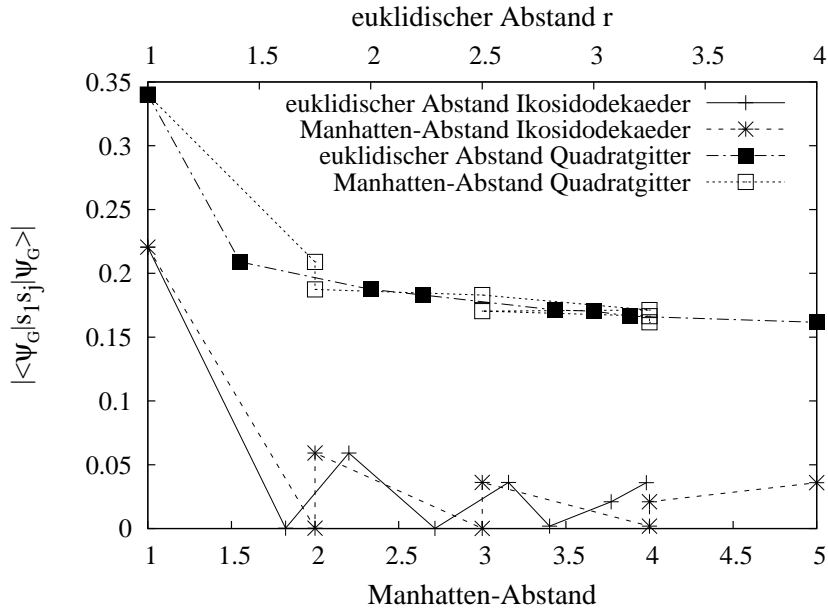


Abbildung 2.33.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $|\langle \psi_G | s_i s_j | \psi_G \rangle|$ des Ikosidodekaeders und des Quadratgitters mit $N = 32$ in Abhängigkeit vom Manhattan- und euklidischen Abstand bei $T = 0$. Die Linien sind lediglich eine Verbindung der Datenpunkte.

zahl der Spins, die man passiert, um auf dem kürzesten Weg, sich auf den Bindungen bewegend, zu dem entsprechenden Nachbarn zu gelangen. Die Frustration im Ikosidodekaeder schwächt die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen im Vergleich zum Quadratgitter deutlich. Während die nächsten Nachbarn des Ringes stärker korreliert sind als die des Quadratgitters, existieren beim Ikosidodekaeder keine Spin-Spin-Korrelationsfunktionen welche größer sind. Des Weiteren ist in Abbildung 2.33 auffällig, dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der Spins, welche auf einem der beiden Zehnecke sitzen, zu dem auch der Spin eins gehört, nicht nahezu null sind wie die restlichen drei Spin-Spin-Korrelationsfunktionen.

In Abbildung 2.34 werden die gemittelten Summen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen m_z , m_s und m_{xx} gezeigt, die nach

$$m_z = \frac{1}{dN} \sum_{j=2}^N |\langle \psi_G | s_1^z s_j^z | \psi_G \rangle| \quad (2.30)$$

$$m_s = \frac{1}{dN} \sum_{j=2}^N |\langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_j | \psi_G \rangle| \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} m_{xx} &= \frac{1}{dN} \sum_{j=2}^N |\langle \psi_G | s_1^x s_j^x + s_1^y s_j^y | \psi_G \rangle| \\ &= \frac{2}{dN} \sum_{j=2}^N |\langle \psi_G | s_1^x s_j^x | \psi_G \rangle| \end{aligned} \quad (2.32)$$

berechnet wurden. Mit d wird hier die Entartung des jeweiligen Zustandes bezeichnet. Besteht eine Entartung, so wird demnach der arithmetische Mittelwert der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gebildet. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen m_{xx} liegen transversal zum von außen angelegten Feld, das in z -Richtung wirkt. Im Grenzfall

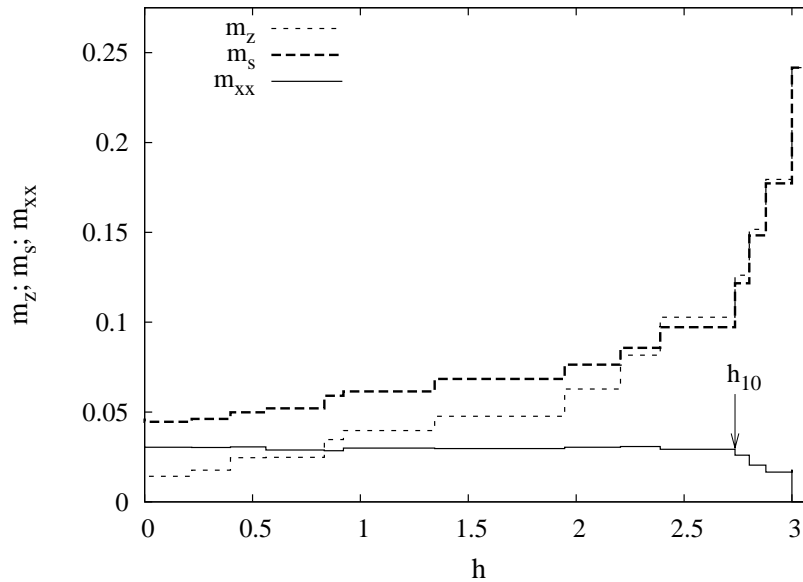


Abbildung 2.34.: Die gemittelten Spin-Spin-Korrelationsfunktionen m_z , m_s und m_{xx} des Ikosidodekaeders mit $s = \frac{1}{2}$ bei $T = 0$ in Abhängigkeit von h .

von $h = h_s$ ist $m_z = m_s = 29/(4N)$ und $m_{xx} = 0$. Betrachtet man die Entwicklung von m_z , m_s und m_{xx} von $h = 0$ aus, so ist ersichtlich, dass m_z und m_s mit den Schritten von h_n zunehmen. Das in z -Richtung angelegte Feld beeinflusst interessanterweise die gemittelte Summe der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen m_{xx} bis $h_{10} = 2.7360532$, nur geringfügig, was vermutlich darauf zurückgeführt werden kann, dass es die zum Feld transversalen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sind. m_{xx} nimmt bis zum zehnten Sprung h_{10} mehrfach ab und zu. Ab $h = 2.7360532$ nehmen m_z und m_s stärker zu und m_{xx} , außer bei $h = h_s$, ab. Die verstärkte Zunahme von m_z und m_s in der Nähe der Sättigung steht offenbar mit der Abnahme von m_{xx} in Zusammenhang. Dies wird

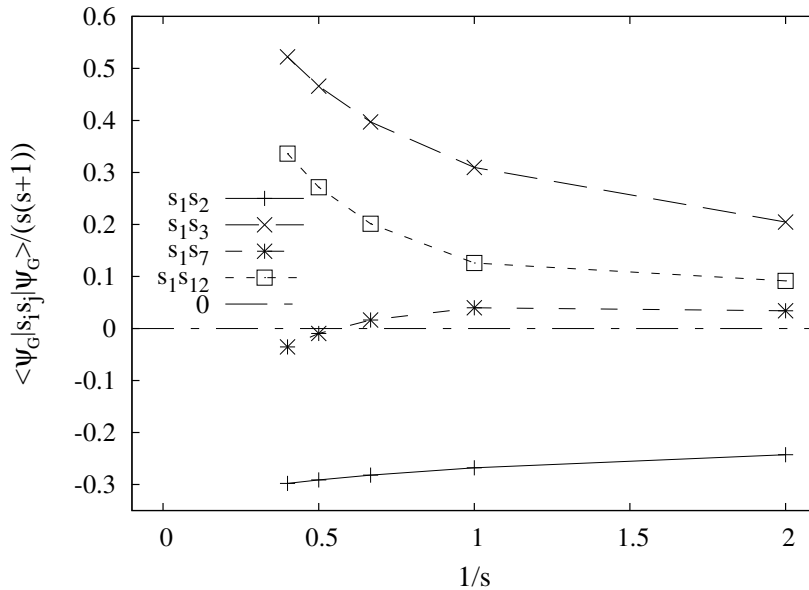


Abbildung 2.35.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{5}{2}$ in der Mitte des $1/3$ -Plateaus ($h = h_{M(1/3)}$) in Abhängigkeit von $1/s$ bei $T = 0$. Die Linien sind nur eine Verbindung der Datenpunkte.

durch das klassische Bild nahegelegt, indem das äußere Feld annähernd parallele Spins am Sättigungsfeld parallel ausrichtet.

Als Nächstes werden die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders auf dem $1/3$ -Plateau untersucht. Diese Ergebnisse können für Experimente wichtig sein, da das $1/3$ -Plateau eine herausragende Breite hat und somit im Experiment leichter zugänglich sein sollte. Zunächst werden die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}, 1, \dots, \frac{5}{2}$ in der Mitte des $1/3$ -Plateaus ($h = h_{M(1/3)}$) im Grundzustand in Abbildung 2.36 vorgestellt. Wie im Grundzustand ohne äußeres Feld sind die nächsten Nachbarn antiferromagnetisch zueinander eingestellt. Zudem wechseln die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 | \psi_G \rangle$ wieder das Vorzeichen mit abnehmendem Einfluss der Quantenfluktuationen. Im Unterschied zu dem Verhalten der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ohne äußeres Feld bleiben $\langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 | \psi_G \rangle$ und $\langle \psi_G | \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{12} | \psi_G \rangle$ ferromagnetisch. Eine weitere bemerkenswerte Abweichung zu $h = 0$ ist, dass sich ganzzahlige sowie halbzahlige s ohne sichtbare Unterschiede ihrem klassischen Wert annähern. Der Grundzustand bei $h = h_{M(1/3)}$ besitzt demnach eine Quantenzahl S , welche durch Spins mit ganz- oder halbzahligem s auf einem Dreieck realisierbar ist.

In Abbildung 2.36 wird der Einfluss der thermischen Fluktuationen auf das Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$ bei drei Feldern innerhalb des $1/3$ -Plateaus und in der Sättigung in Abbildung 2.36 dargestellt. Die Felder innerhalb des $1/3$ -Plateaus liegen am Anfang, in der Mitte und am Ende (bei $h = h_{A(1/3)}$, $h = h_{M(1/3)}$ und $h = h_{E(1/3)}$). Mit diesen drei Feldern soll die Entwicklung innerhalb des $1/3$ -Plateaus angedeutet werden. Abbildung 2.36 (a), (b) und (c) machen deutlich, dass die nächsten Nachbarn auf dem

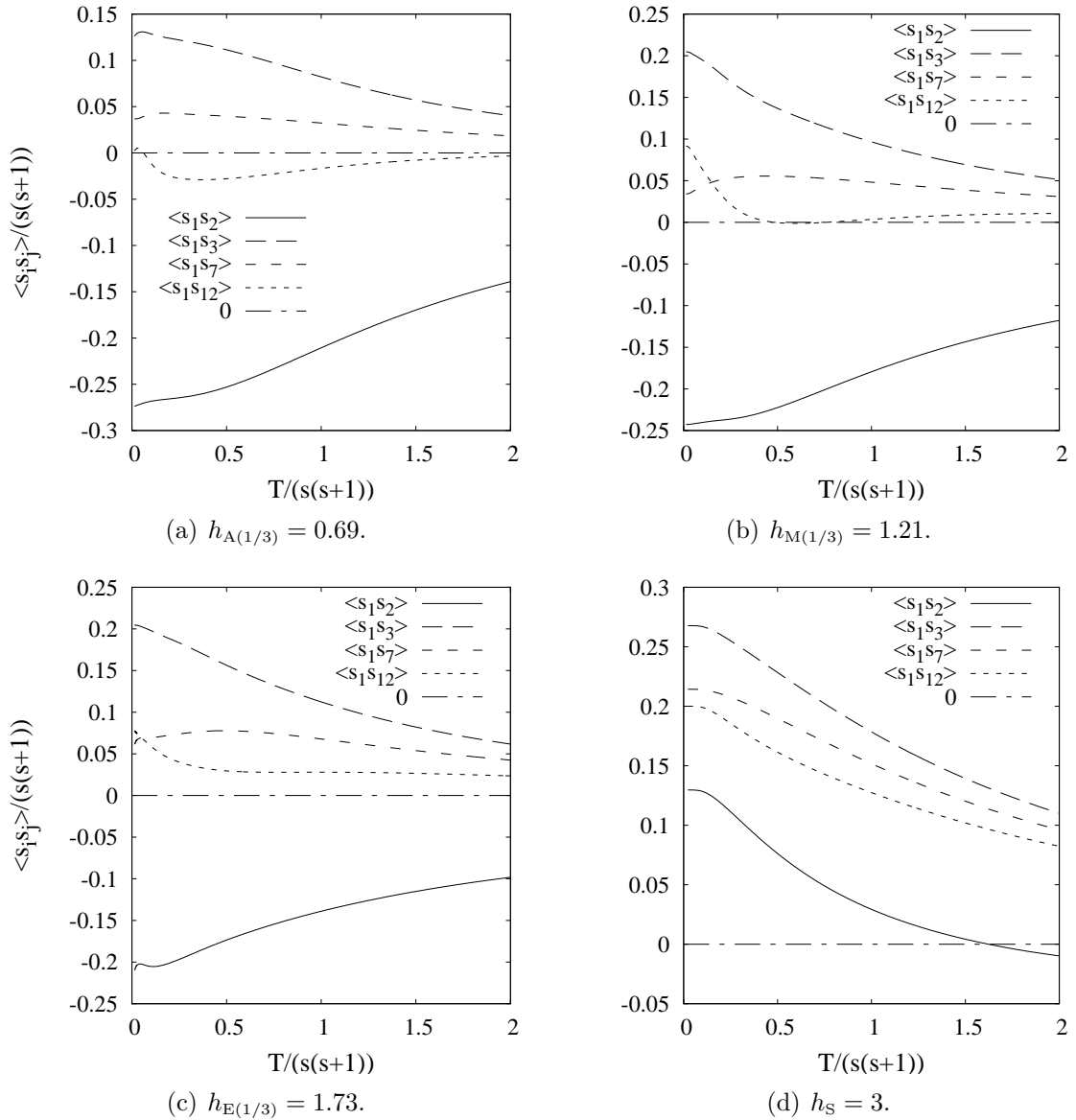


Abbildung 2.36.: Die vier Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle s_i s_j \rangle / (s(s+1))$ des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$ in (a) am Anfang des 1/3-Plateaus ($h = h_{A(1/3)}$) mit $s = \frac{1}{2}$, in (b) in der Mitte des 1/3-Plateaus ($h = h_{M(1/3)}$) mit $s = \frac{1}{2}$, in (c) am Ende des 1/3-Plateaus ($h = h_{E(1/3)}$) mit $s = \frac{1}{2}$ und in (d) am Sättigungsfeld ($h = h_S$) in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. Zur Orientierung wurde auch eine Linie bei Null dargestellt.

Plateau antiferromagnetisch und die übernächsten Nachbarn ferromagnetisch korreliert sind. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der drittnächsten Nachbarn wechseln hingegen für $h = h_{A(1/3)}$ und $h = h_{M(1/3)}$ (Abbildung 2.36 (a) und (b)) das Vorzeichen. Für $h = h_{E(1/3)}$ (Abbildung 2.36 (c)) bleibt das Vorzeichen erhalten. Zu Beginn des 1/3-Plateaus sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn deut-

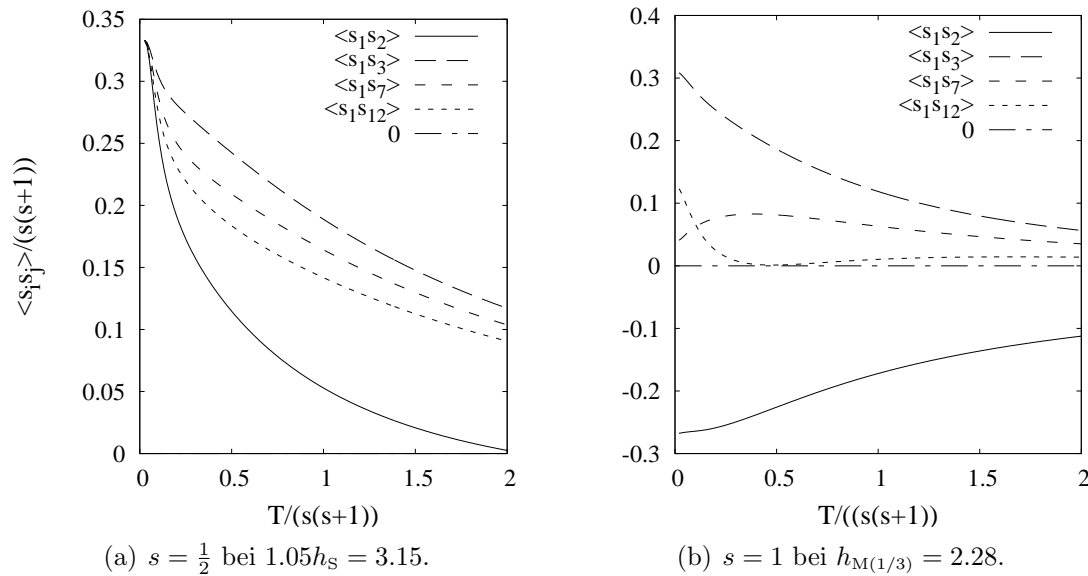


Abbildung 2.37.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle / (s(s+1))$ des Kuboktaeders in (a) mit $s = \frac{1}{2}$ bei $1.05h_S = 3.15$ und in (b) mit $s = 1$ bei $h_{M(1/3)} = 2.28$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$.

lich stärker als die der übernächsten Nachbarn. Dieses Verhalten ändert sich zur Mitte hin und dann nochmals zum Ende des $1/3$ -Plateaus. Am Sättigungsfeld für $h = h_S$ (Abbildung 2.36 (d)), bei dem die Energie neunfach entartet ist, sind bei tiefen Temperaturen alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ferromagnetisch. Im Gegensatz zu den Feldern innerhalb des Plateaus sind die nächsten Nachbarn bei $h = h_S$ am wenigsten korreliert. Am Ende des gezeigten Temperaturbereichs in Abbildung 2.36 (d) nehmen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn ein negatives Vorzeichen an.

In Abbildung 2.37 wird die Temperaturabhängigkeit der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in (a) für die Quantenzahl $\frac{1}{2}$ bei $h = 1.05h_S$ und in (b) bei $h_{M(1/3)} = 2.28$ für die Quantenzahl $s = 1$ dargestellt. Die Darstellung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in (a) zeigt die Wirkung des Feldes in der Sättigung. Alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen streben bei tiefen Temperaturen gegen $\langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle / (s(s+1)) = \frac{1}{4} \cdot \frac{4}{3} = \frac{1}{3}$. Erst ab einem Wert von $T/(s(s+1)) \approx 2.1$, der nicht dargestellt ist, haben die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn ein negatives Vorzeichen. Zu Abbildung 2.37 (d) ist zu bemerken, dass die nächsten Nachbarn bei tiefen Temperaturen in der Mitte des $1/3$ -Plateaus weniger stark korreliert sind, als die übernächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 \rangle$. Mit zunehmender Temperatur wird der Einfluss der Frustration und der Quantenfluktuationen geringer und die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn sind wieder die Stärksten. Das qualitative Verhalten der vier Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders mit $s = 1$ bei $h_{M(1/3)}$ ist dem entsprechenden Verhalten bei $s = \frac{1}{2}$ ähnlich.

Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn des Kuboktaeders sind auf dem $1/3$ -Plateau im Vergleich mit dem unfrustrierten Ring mit $N = 12$ und $s = \frac{1}{2}$ (Abbildung 2.14 (a), (b), (c)) kleiner. Weiterhin alternieren die Vorzeichen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Ringes entsprechend der Abstände bei tiefen Temperaturen. Beim Kuboktaeder ist dies aufgrund der Frustration nur bei nächsten und übernächsten Nachbarn zu beobachten. Ebenso wie beim Ring bewirkt das von außen angelegte Feld $h_{M(1/3)}$ und $h_{E(1/3)}$ außer bei den nächsten Nachbarn des Kuboktaeders eine ferromagnetische Ausrichtung der Spins bei höheren Temperaturen. Die Änderung des Feldes von $h_{A(1/3)}$ nach $h_{M(1/3)}$ bis $h_{E(1/3)}$ beeinflusst die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 \rangle / (s(s+1))$ des Kuboktaeders am meisten. Am Sättigungsfeld wechseln wie beim Ring ausschließlich die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn bei höheren Temperaturen das Vorzeichen, jedoch nähern sich nicht alle Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei tiefen Temperaturen zwei Werten an (Abbildung 2.14 (a)). Bei $1.05h_s = 3.15$ ist das Verhalten des unfrustrierten und des frustrierten Systems mit $N = 12$ bei tiefen Temperaturen gleichartig. Auffällig ist im Vergleich von Abbildung 2.14 (b) und Abbildung 2.37 (a), dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn beim Kuboktaeder ab $T/(s(s+1)) \approx 2.1$ antiferromagnetisch sind, wohingegen beim Ring der Wert schon bei $T/(s(s+1)) \approx 0.8$ liegt.

2.5.6. Spezifische Wärmen

Um einen Überblick über das Verhalten der spezifischen Wärme des Kuboktaeders mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ zu geben, ist in Abbildung 2.38 in den kleinen Diagrammen der Temperaturbereich $[0,1]$ gezeigt. In den großen Diagrammen sind die in den kleinen Diagrammen durch eine vertikale Linie gekennzeichneten Temperaturbereiche dargestellt, damit die spezifischen Wärmen bei tiefen Temperaturen unterschieden werden können und der Verlauf der spezifischen Wärme gut zu erkennen ist. Die von außen angelegten Felder sind die in 2.3.4 definierten Felder $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_s, h_s, 1.05h_s$. Im extremen Quantenfall ist zusätzlich die spezifische Wärme am Anfang des $1/3$ -Plateaus bei $h_{A(1/3)} = 0.69$ zu sehen.

Liegt kein äußeres Feld an, so existieren für $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ stark ausgeprägte Tieftemperatur-Maxima. Entspricht das Feld der Sättigungsfeldstärke h_s , besitzen die spezifischen Wärmen nur noch ein Maxima. Um diese beiden Fälle von den anderen Feldern besser differenzieren zu können, ist die Linienstärke dicker. Bei den Feldern $h_{A(1/3)}, h_{E(1/3)}, 0.95h_s, 1.05h_s$ sind auch Tieftemperatur-Maxima zu erkennen. Sie sind aber schwächer als bei $h = 0$ ausgeprägt. In der Mitte der $1/3$ -Plateaus weist die spezifische Wärme bei beiden Quantenzahlen Schultern auf.

Die Maxima bei kleineren Temperaturen sind auf Multipletts zurückzuführen. Vergleicht man die spezifischen Wärmen bei $h = 0$ mit den entsprechenden Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, so stellt man fest, dass das Tieftemperatur-Maximum im Fall von $s = \frac{1}{2}$ bei dem Schnittpunkt der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der übernächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_3 \rangle$ und $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 \rangle$ zu finden ist. Dieser Schnittpunkt kann bei

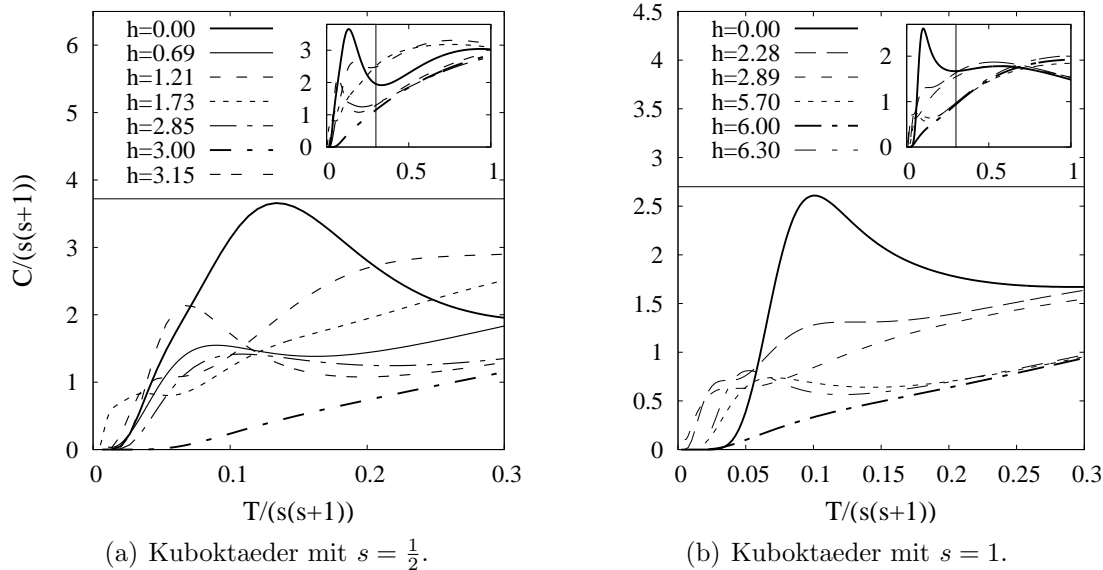
(a) Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$.(b) Kuboktaeder mit $s = 1$.

Abbildung 2.38.: Die spezifische Wärme $C/(s(s+1))$ des Kuboktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von $T/(s(s+1))$. In den kleinen Diagrammen ist zur Orientierung ein größerer Temperaturbereich dargestellt als in den großen. Gezeigt werden die spezifischen Wärmen für $h = 0, h_{M(1/3)}, h_{E(1/3)}$ sowie in der Nähe und bei der Sättigungs-Feldstärke $0.95h_S, h_S, 1.05h_S$. Im Fall von (a), d.h. bei $s = \frac{1}{2}$, wird zusätzlich die spezifische Wärme am Anfang des $1/3$ -Plateaus bei $h = h_{A(1/3)}$ abgebildet.

$T/(s(s+1)) \approx 0.1 \cdot 4/3 = 0.1\bar{3}$ angesiedelt werden. Beim Kuboktaeder mit $s = 1$ liegt das Tieftemperatur-Maxima bei $T/(s(s+1)) \approx 0.2 \cdot \frac{1}{2} = 0.1$, was mit dem Schnittpunkt der übernächsten und drittnächsten Nachbarn $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_7 \rangle$ und $\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_{12} \rangle$ vergleichbar ist. Ein Zusammenhang zwischen den Kreuzungen von Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und Tieftemperatur-Maxima ist denkbar, da diese Maxima auf besondere Freiheitsgrade zurückgeführt werden können. An dieser Stelle wird daran erinnert, dass die Extrema der spezifischen Wärme im Fall von $h = 0$ die Wendepunkte der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn sind. Die Betrachtung der spezifischen Wärmen legt den Schluss nahe, dass zwei Energieskalen existieren. Der Vergleich mit den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen zeigt, dass die erste Skala den Bereich der starken Änderungen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen abdeckt, indem auch die Tieftemperatur-Maxima liegen. Das in jedem System bei höheren Temperaturen existierende Maxima ist ein Beleg für die zweite Energieskala.

Die existierenden Tieftemperatur-Maxima des unfrustrierten Rings mit $N = 12$, die in Abbildung 2.16 gezeigt werden, sind bedeutend kleiner als beim Kuboktaeder. Somit können die außerordentlich großen Tieftemperatur-Maxima des Kuboktaeders als Frustrationseffekte eingeordnet werden.

2.6. MAGNETOKALORISCHER EFFEKT

In [8] konnte gezeigt werden, dass die durch Ecken-teilende-Dreiecke hervorgerufene Frustration zu einem erhöhten magnetokalorischen Effekt mit hohen Abkühlungsraten am Sättigungsfeld führt. Als magnetokalorischen Effekt bezeichnet man das Abkühlen oder Erhitzen eines magnetischen Systems durch die Variation eines von außen angelegten magnetischen Feldes h . Beim Erreichen von Temperaturen unterhalb eines Kelvins fanden magnetokalorischen Effekte bereits vor mehr als 70 Jahren ihre Anwendung [78]. Die dabei verwendeten adiabatischen Zustandsänderungen könnten in einem Carnot Kreisprozess zur magnetischen Kühlung genutzt werden [79]. Für eine adiabatische Zustandsänderung bei der die Entropie S_E konstant ist und die deshalb auch als isentropisch bezeichnet wird, findet man die Relation

$$\left(\frac{\partial T}{\partial h}\right)_{S_E} = -\frac{T}{C(T, h)} \left(\frac{\partial S_E}{\partial h}\right)_T. \quad (2.33)$$

Bei idealen Paramagneten gilt für die sogenannte Abkühlungsrate die einfache Beziehung [80]

$$\left(\frac{\partial T}{\partial h}\right)_{S_E}^{\text{Para}} = \frac{T}{h}. \quad (2.34)$$

In der Vergangenheit wurden paramagnetische Salze als Arbeitssubstanz verwendet, was die Abkühlungsrate auf 2 K/T begrenzt hat. Aktuell verwendete Materialien sind die Gadolinium Verbindungen $\text{Gd}_5\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ oder $\text{Gd}_5\text{Si}_2\text{Ge}_2$ [80, 81]. In Systemen, die kollektiven Magnetismus aufweisen, kann die adiabatische Abkühlungsrate größer oder kleiner als $(\partial T/\partial h)_{S_E}^{\text{Para}}$ sein und das Vorzeichen wechseln. Abhängig von der Struktur der Systeme kann man bei wechselwirkenden Spinsystemen eine Erhitzung des Systems beim Entmagnetisieren sowie eine Abkühlung während der Magnetisierung beobachten [82, 83]. Stärkere magnetokalorische Effekte als bei Paramagneten stehen mit besonders großen Werten der Entropie in Zusammenhang. Sie treten z.B. bei Phasenübergängen erster Ordnung zwischen ferromagnetischen Phasen auf, die in $\text{Gd}_5\text{Si}_2\text{Ge}_2$ Verbindungen gefunden wurden [82] und bei Magnetfeldern jenseits quanten-kritischer Punkte liegen [82, 84] oder bei Feldern, bei denen Grundzustands-Zeeman-Niveaus entartet sind [82, 85, 86]. Jedes antiferromagnetisch gekoppelte Spinsystem besitzt Grundzustandsenergie-Kreuzungen, was die Darstellungen der Grundzustandsmagnetisierungen in den vorherigen Abschnitten bestätigen. Die maximale Abkühlungsrate bei diesen Kreuzungen von Energieniveaus kann hohe Werte annehmen. Das belegt Abbildung 2.39 für den Ring und Abbildung 2.40 für das Kuboktaeder. In den Diagrammen wird die Temperatur T der Isentropen in Abhängigkeit von h/h_s für kleine Werte der Entropie $S_E/N = 0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3$ dargestellt. Außerdem ist in Abbildung 2.39 (a) das Temperaturverhalten von zwei Isentropen bei Paramagneten gezeigt.

Bei kleinen Werten der Entropie weist der unfrustrierte Ring ein Temperaturver-

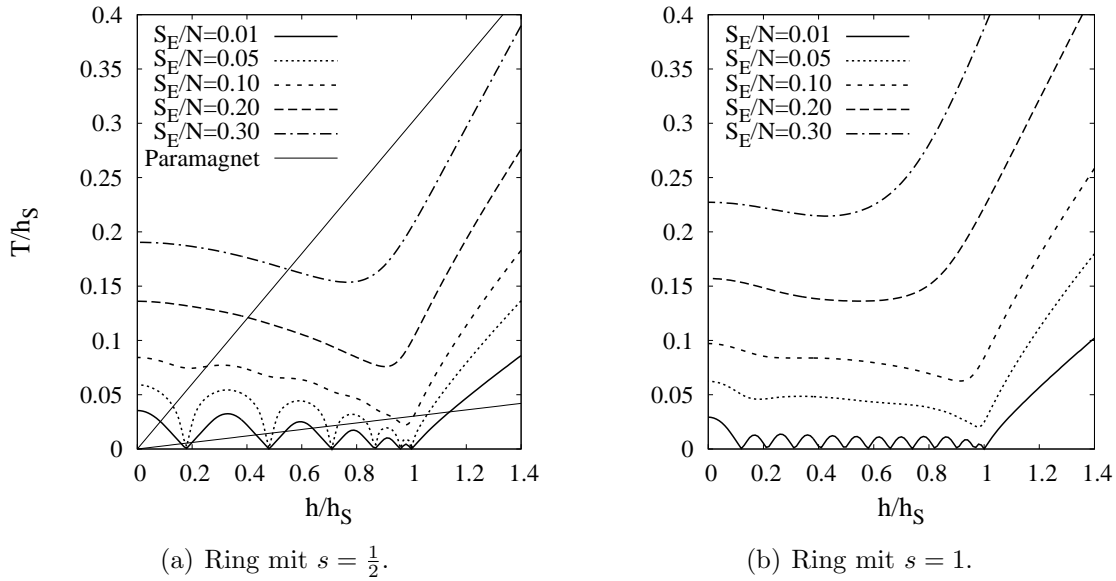


Abbildung 2.39.: Isentropen des Ringes mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ in Abhängigkeit von h/h_S für $S_E/N = 0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3$ und zwei Isentropen eines Paramagnets in (a).

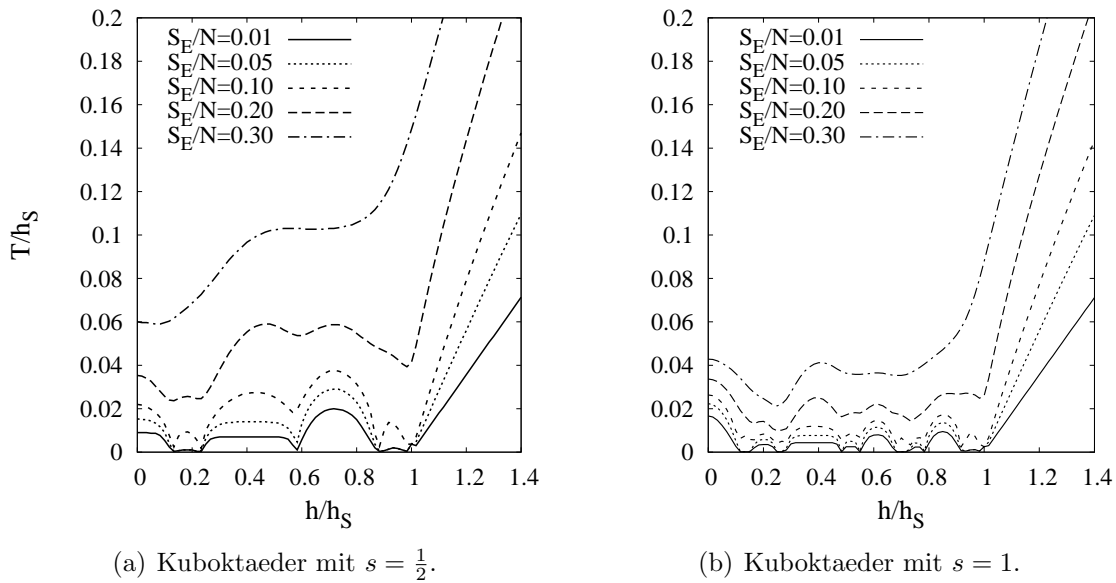


Abbildung 2.40.: Isentropen des Kuboktaeders mit (a) $s = \frac{1}{2}$ und (b) $s = 1$ für $S_E/N = 0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3$ in Abhängigkeit von h/h_S .

halten auf, dass an Zykloiden erinnert, wobei an den Magnetisierungssprüngen die Temperatur gegen null geht. Die maximalen Temperaturen werden ungefähr in der Mitte der Magnetisierungs-Plateaus eingenommen. Mit zunehmender Feldstärke wird

die maximale Temperatur innerhalb eines Plateaus allerdings kleiner. Mit steigender Temperatur verwischt sich die zykloidenartige Struktur. Der Vergleich mit den Isentropen des Paramagneten bestätigt die beschriebenen gravierenden Unterschiede, die gekoppelte Spinsysteme gegenüber paramagnetischen Systemen aufweisen. Der geringere Einfluss der Quantenfluktuationen bei $s = 1$ verschiebt die in den Mitten der Plateaus erreichten maximalen Temperaturen zu kleineren Werten. Schneller als im extremen Quantenfall sind bei $S_E/N = 0.05$ im Temperaturverhalten keine Grundzustandenergie-Kreuzungen mehr zu erkennen.

Auch wenn das Temperaturverhalten des Kuboktaeders wie beim Ring bei kleinen Werten der Entropie stark von den Grundzustandenergie-Kreuzungen geprägt ist, hebt es sich von dem des Ringes ab. Es gibt beim Kuboktaeder Plateaus innerhalb derer nahezu keine Temperaturschwankungen zu beobachten sind. Ein Trend von kleiner werdenden Maxima wie beim Ring ist nicht zu erkennen. Die lokalisierten Magnonen des Kuboktaeders, welche zu einer erhöhten Entartung in der Sättigung führen, sind die Ursache für einen verstärkten magnetokalorischen Effekt bei der Sättigungsfeldstärke h_s [8]. Lokalisierte Magnonen stehen mit einer vergrößerten Entartung von Energieniveaus im Zusammenhang und in Systemen wie den Kagomé-Ketten [87] sowie dem Kagomé-Gitter [75] mit dem Auftreten von flachen Bändern.

ÜBERGANG VON EINER DIMENSION ZU ZWEI DIMENSIONEN

Der Einfluss der Quantenfluktuationen ist besonders stark in niedrigen Dimensionen zu spüren. In einer Dimension verhindern die Quantenfluktuationen die Existenz von magnetischer Fernordnung. Zweidimensionale Systeme sind hingegen meistens im Grundzustand geordnet. Das Entstehen von Fernordnung im Heisenberg-Modell bei $T = 0$ ist eine Besonderheit des Übergangs von einer zu zwei Dimensionen, die schon viele Untersuchungen stimuliert hat z.B. [37–41]. Fernordnung ist dadurch charakterisiert, dass gilt: $\lim_{\mathbf{r}_{i,j} \rightarrow \infty} \langle \psi_G | \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j | \psi_G \rangle \neq 0$. Hier ist $\mathbf{r}_{i,j}$ der Abstand zwischen den Spins i und j . Während im vorangegangenen Kapitel 2 (Nulldimensionale Systeme) unter anderem die Rolle der Quantenfluktuationen durch die Vergrößerung der Quantenzahl s studiert wurde, steht in diesem Kapitel der Einfluss der Dimensionalität im Vordergrund. In diesem Kapitel wird das XY-Modell diskutiert, welches analog zum Heisenberg-Modell im Grundzustand in einer Dimension ungeordnet ist und auf dem Quadratgitter in zwei Dimensionen eine magnetische Ordnung aufweist. Aufgrund der größeren Untergittermagnetisierung des XY-Modells auf dem Quadratgitter, kann man zu dem Schluss kommen, dass der Einfluss der Quantenfluktuationen im XY-Modell geringer ist als beim isotropen Heisenberg-Modell. Die hier vorgestellten Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie und der exakten Diagonalisierung dienen in [50] der Einschätzung einer weiteren Methode zur Untersuchung von Spinsystemen: der Jordan-Wigner Fermionisierung [88–102], die auch als Jordan-Wigner Transformation bezeichnet wird. Ergebnisse der Untersuchungen des isotropen Heisenberg-Modells sowie des isotropen XY-Modells zweidimensionaler Spinsysteme mit $s = \frac{1}{2}$ mittels der Jordan-Wigner Transformation sind in [88–98, 103–106] dokumentiert. Im Folgenden wird die Fragestellung nach der Bindungsstärke bei der sich die magnetische Ordnung etabliert und der Art und Weise des Entstehens der magnetischen Ordnung beim Übergang des XY-Modells von einer zu zwei Dimensionen behandelt.

3.1. DAS XY-MODELL

Im Unterschied zu Kapitel 2, Kapitel 4 und Kapitel 5 wird in diesem Kapitel das XY-Modell studiert, welches im Stande ist, Anisotropien in Spinsystemen zu beschreiben. Anisotropien können durch gebrochene Symmetrien im Kristallgitter hervorgerufen

werden. Der Hamilton-Operator des XY-Modells

$$H = \sum_{i < j} J_{i,j} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y) \quad (3.1)$$

enthält die x- und y-Komponenten der Spinoperatoren. In diesem Kapitel werden die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung (bei $T = 0$) des XY-Modells für den Übergang von einer zu zwei Dimensionen berechnet. Dazu wird das Quadratgitter herangezogen, da es im Grenzfall von verschwindenden vertikalen oder horizontalen Bindungen in Ketten übergeht. Alle Betrachtungen beschränken sich in diesem Kapitel auf den Fall $s = \frac{1}{2}$.

3.1.1. Lineare Spinwellentheorie

Die Grundlage für die folgenden Untersuchungen des Übergangs von einer zu zwei Dimensionen bildet [107]. Gomez-Santos und Joannopoulos veröffentlichten in [107] unter anderem ihre Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie für die Kette und das Quadratgitter. Um die z-Achse als Quantisierungsachse verwenden zu können, wird die Transformation $s^x \rightarrow -s^z$, $s^y \rightarrow -s^x$ auf Gleichung (3.1) angewendet. Bezeichnet man horizontale Bindungen mit dem Austauschintegral J , vertikale mit J_\perp und führt man außerdem einen Parameter γ ein, welcher das XY-Modell ($\gamma = 0$) in das Ising-Modell ($\gamma = 1$) übergehen lässt, so erhält man

$$H = \sum_{i < j} J [(1 - \gamma) s_i^x s_j^x + (1 + \gamma) s_i^z s_j^z] + J_\perp [(1 - \gamma) s_i^x s_j^x + (1 + \gamma) s_i^z s_j^z]. \quad (3.2)$$

Durch eine Vergrößerung von $\gamma = 0$ wird der Einfluss der Quantenfluktuationen verkleinert bis er im Ising-Modell bei $\gamma = 1$ nicht mehr vorhanden ist.

Bei bipartiten Systemen können im XY-Modell die ferromagnetischen Zustände durch unitäre Transformationen, welche die Vorzeichen invertieren, in die antiferromagnetischen Zustände überführt werden. Da Ringe und Quadratgitter im Limes $N \rightarrow \infty$ bipartit sind, können ohne Einschränkung der Allgemeinheit ferromagnetische Austauschintegrale $J < 0$ und $J_\perp < 0$ angenommen werden. Endliche Ringe und endliche Quadratgitter mit einer ungeraden Anzahl von Spins N sind bei periodischen Randbedingungen frustriert und nicht bipartit.

Entsprechend zeigen die Quantisierungsachsen aller Spins in dieselbe Richtung. Die geometrische Einheitszelle des Quadratgitters kann für die Spinwellentheorie verwendet werden. Sie enthält einen Spin und zwei Bindungen. Die Basisvektoren des Quadratgitters sind

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Summiert man die Hamilton-Operatoren H_n der N_{EZ} Einheitszellen, so entsteht der

Hamilton-Operator (3.1)

$$H = \sum_n^{N_{EZ}} H_n . \quad (3.4)$$

Das Umschreiben der Wechselwirkungen einer Einheitszelle in Stufenoperatoren s^\dagger und s^- ergibt

$$\begin{aligned} H_n = & J \frac{1-\gamma}{4} (s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger + s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^- + s_{\mathbf{R}_n}^- s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger + s_{\mathbf{R}_n}^- s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^-) \\ & + J(1+\gamma) \left(s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n}^- - \frac{1}{2} \right) \left(s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^- - \frac{1}{2} \right) \\ & + J_\perp \frac{1-\gamma}{4} (s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger + s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^- + s_{\mathbf{R}_n}^- s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger + s_{\mathbf{R}_n}^- s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^-) \\ & + J_\perp(1+\gamma) \left(s_{\mathbf{R}_n}^\dagger s_{\mathbf{R}_n}^- - \frac{1}{2} \right) \left(s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger s_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^- - \frac{1}{2} \right) . \end{aligned} \quad (3.5)$$

\mathbf{R}_n bezeichnet in dieser Schreibweise den Vektor vom Ursprung zum Spin in der n -ten Einheitszelle. Mit der Holstein-Primakoff Transformation in linearer Näherung

$$s^\dagger = \sqrt{2s}\alpha \quad \text{und} \quad s^- = \sqrt{2s}\alpha^\dagger \quad (3.6)$$

erhält man den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H = & \sum_n^{N_{EZ}} \left\{ J \frac{1-\gamma}{4} (\alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger + \alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1} + \alpha_{\mathbf{R}_n} \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger + \alpha_{\mathbf{R}_n} \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}) \right. \\ & + J(1+\gamma) \left(\alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n} - \frac{1}{2} \right) \left(\alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_1} - \frac{1}{2} \right) \\ & + J_\perp \frac{1-\gamma}{4} (\alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger + \alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2} + \alpha_{\mathbf{R}_n} \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger + \alpha_{\mathbf{R}_n} \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}) \\ & \left. + J_\perp(1+\gamma) \left(\alpha_{\mathbf{R}_n}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n} - \frac{1}{2} \right) \left(\alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{R}_n+\mathbf{a}_2} - \frac{1}{2} \right) \right\} , \end{aligned} \quad (3.7)$$

wobei die Operatoren α^\dagger, α den Vertauschungsrelationen von Boseoperatoren

$$[\alpha, \alpha^\dagger]_- = 1 \quad (3.8)$$

gehorschen. Die Anzahl der unterschiedlichen Boseoperatoren, die einzuführen sind, ist durch die Anzahl der Spins in der Einheitszelle festgelegt. Entsprechend ist sie in

diesem Fall eins. Mit der Fouriertransformation

$$\alpha_{\beta} = \frac{1}{\sqrt{N_{EZ}}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\beta) \alpha_{\mathbf{k}} \quad (3.9)$$

$$\alpha_{\beta}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_{EZ}}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(+i\mathbf{k}\beta) \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (3.10)$$

kann (3.7) unter Verwendung der Vertauschungsrelation (3.8) sowie der Symmetrie-Relation

$$H = \frac{1}{2}(H_{\mathbf{k}} + H_{-\mathbf{k}}) \quad (3.11)$$

in

$$\begin{aligned} H &= \frac{3}{4}N(1+\gamma)(J+J_{\perp}) \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \{[(1-\gamma)J_{\mathbf{k}} - 2(1+\gamma)(J+J_{\perp})(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger})] \\ &+ (1-\gamma)J_{\mathbf{k}}(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{-\mathbf{k}})\} \end{aligned} \quad (3.12)$$

umgeformt werden. Dabei wurde die Darstellung der Delta-Distribution

$$\sum_n^{N_{EZ}} \exp\{i\mathbf{R}_n(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\} = N_{EZ}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (3.13)$$

genutzt. Die reziproken Gittervektoren lassen sich aus

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (3.14)$$

bestimmen, wobei für die Komponenten $-\pi \leq k_x + \pi$ und $-\pi \leq k_y \leq +\pi$ gilt. Mittels der Bogolyubov-Transformation

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \cosh(u_{\mathbf{k}})\gamma_{\mathbf{k}} + \sinh(u_{\mathbf{k}})\gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (3.15)$$

$$\alpha_{-\mathbf{k}}^{\dagger} = \sinh(u_{\mathbf{k}})\gamma_{\mathbf{k}} + \cosh(u_{\mathbf{k}})\gamma_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (3.16)$$

lässt sich die quadratische Form (3.12) diagonalisieren. Für die symmetrische Funktion $u_{\mathbf{k}} = u_{-\mathbf{k}}$ gilt die Beziehung

$$\tanh(2u_{\mathbf{k}}) = \frac{(1-\gamma)J_{\mathbf{k}}}{2(1+\gamma)(J+J_{\perp}) - (1-\gamma)J_{\mathbf{k}}} \quad (3.17)$$

Mit der Dispersionsrelation

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{(1+\gamma)^2(J+J_{\perp})^2 - (1-\gamma^2)(J+J_{\perp})J_{\mathbf{k}}} \quad (3.18)$$

lautet der diagonalisierte Hamilton-Operator

$$H = \frac{3}{4}N(1 + \gamma)(J + J_{\perp}) + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(\gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.19)$$

Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V_{\text{BRZ}}} \int_{V_{\text{BRZ}}} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (3.20)$$

mit V_{BRZ} , dem Volumen der ersten Brillouin-Zone. Die Grundzustandsenergie pro Platz sowie die Untergittermagnetisierung im Grundzustand erhält man dementsprechend aus den Integrationen

$$\frac{E_{\text{G}}}{N} = \frac{3}{4}N(1 + \gamma)(J + J_{\perp}) + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dk_x \int_{-\pi}^{+\pi} dk_y \omega_{\mathbf{k}} \quad (3.21)$$

$$m_{\text{UG}}^z = 1 - \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{+\pi} dk_x \int_{-\pi}^{+\pi} dk_y \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2(2u_{\mathbf{k}})}}. \quad (3.22)$$

Dabei ist

$$m_{\text{UG}}^z = \langle \psi_{\text{G}} | S_{\text{UG}}^z | \psi_{\text{G}} \rangle = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\text{G}} | \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}} | \psi_{\text{G}} \rangle \quad (3.23)$$

als Definition für die Untergittermagnetisierung verwendet worden. Der Parameter der Austausch-Anisotropie γ kann nur positive Werte und Null annehmen, ansonsten existieren Werte von $\tanh(2u_{\mathbf{k}})$, welche eins überschreiten. Um (3.7) zu erhalten, wurde angenommen, dass im Spinraum eine Fernordnung in z-Richtung herrscht. Mit $\gamma < 0$ trifft diese Annahme jedoch nicht zu. Die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung bei $T = 0$ werden gemeinsam mit den Daten der Extrapolation im nächsten Abschnitt dargestellt. Mit Hilfe der Gauß-Legendre-Quadratur [53], welche ein Spezialfall der Gauß-Quadratur ist, kann die numerischen Integration erfolgen.

3.1.2. Extrapolation der Daten der exakten Diagonalisierung

In diesem Abschnitt werden Extrapolationen von Daten, welche aus der exakten Diagonalisierung gewonnen wurden, für die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung im Grundzustand des isotropen (d.h. $\gamma = 0$) XY-Modells vorgestellt. Der Übergang von einer zu zwei Dimensionen wird durch die Variation des Parameters der räumlichen Anisotropie $R = J/J_{\perp}$ vollzogen.

Zur exakten Diagonalisierung wurden zwei auf ihrer Kante stehende und drei auf einer Ecke stehende Quadratgitter verwendet. Die auf der Kante stehenden quadratischen Gitter besitzen $N = 16, 36$ Spins und die auf der Ecke stehenden $N = 8, 18, 32$

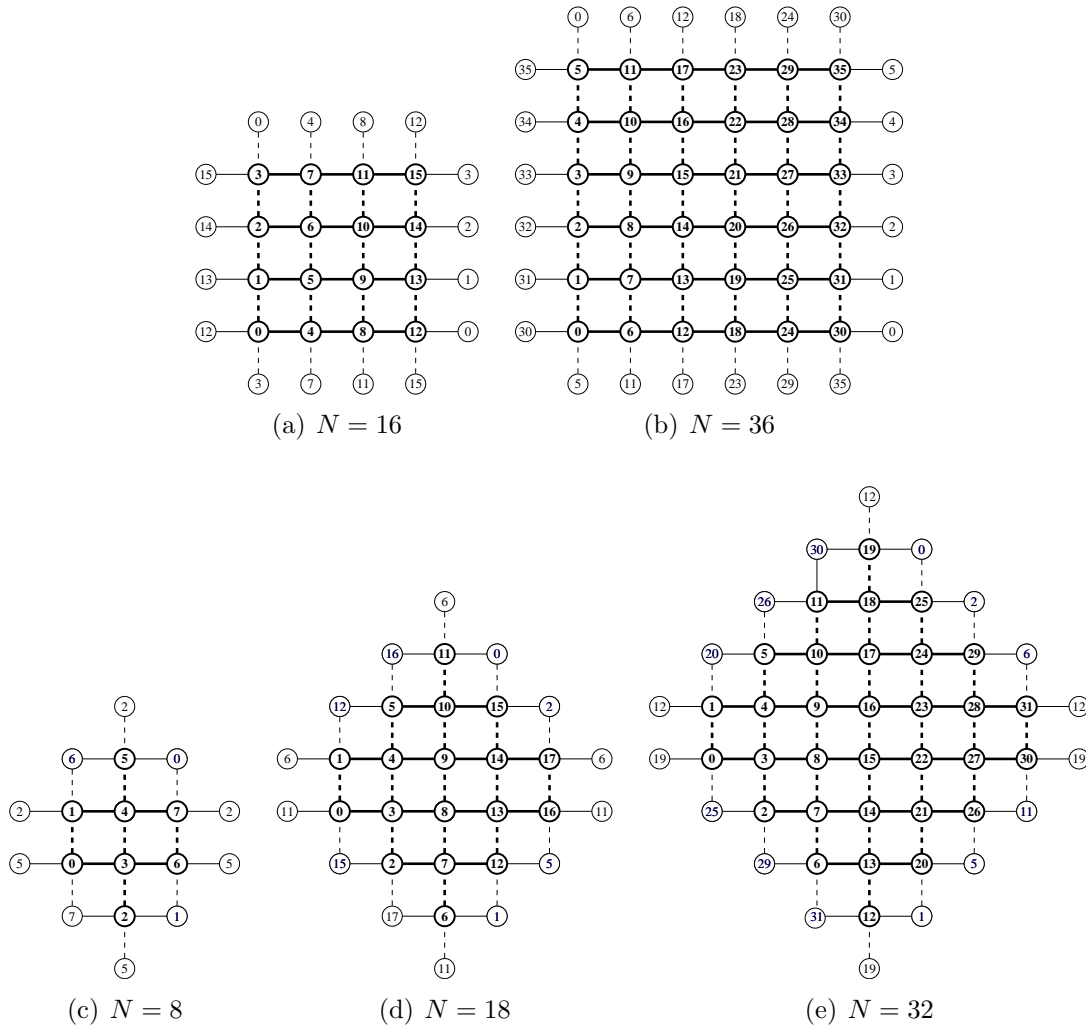


Abbildung 3.1.: Die auf einer Kante stehenden quadratischen Gitter mit $N = 16, 32$ in (a) und (b) sowie die auf einer Ecke stehenden Gitter mit $N = 8, 18, 32$ in (c), (d) und (e) jeweils mit periodischen Randbedingungen. Die Spins sind beginnend mit Null nummeriert. Dicke Linien kennzeichnen Bindungen innerhalb der Gitter und dünne Linien die periodischen Randbedingungen.

Spins. Alle Quadratgitter sind in Abbildung 3.1 zu sehen. Mit den dicken Linien werden Bindungen innerhalb eines Gitters gekennzeichnet, wohingegen dünne Linien die periodischen Randbedingungen symbolisieren. Die durchgezogenen Linien repräsentieren die horizontalen Bindungen J und die gestrichelten Linien die vertikalen Bindungen J_{\perp} .

Die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie pro Spin E_G/N und die Untergittermagnetisierung m_{UG}^x der endlichen Gitter sind in tabellarischer Form in [50] zu finden. Allerdings wurde die Grundzustandsenergie in [50] mit e_0 und die Untergittermagnetisierung mit m^{x2} bezeichnet. Die Definitionen der verwendeten Untergittermagneti-

sierungen m_{UG}^x und m_{UG}^y lauten bei $T = 0$:

$$m_{\text{UG}}^x = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} |\langle \psi_G | s_i^x s_j^x | \psi_G \rangle| \quad (3.24)$$

und

$$m_{\text{UG}}^y = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} |\langle \psi_G | s_i^y s_j^y | \psi_G \rangle|. \quad (3.25)$$

Aus [108–110] ist bekannt, dass die Grundzustandsenergie im Fall von $R = 0$ und $\gamma = 0$ nach

$$\frac{E_G(N)}{N} = \frac{E_G(\infty)}{N} + \frac{\epsilon_3}{N^{\frac{3}{2}}} + \frac{\epsilon_5}{N^{\frac{5}{2}}} + \dots \quad (3.26)$$

skaliert. Die Korrekturen, die sich aus der Endlichkeit der Gitter ergeben, sind nach [111] bei $R = 0$ und $\gamma = 0$

$$\frac{E_G(N_x)}{N} - \frac{E_G(\infty)}{N} \propto \frac{1}{N_J^2}. \quad (3.27)$$

N_J bezeichnet hier die Anzahl der Spins in horizontaler Richtung, welche über das Austauschintegral J wechselwirken. Zur Extrapolation der Grundzustandsenergien wird das Skalierungsgesetz

$$\frac{E_G(N)}{N} = \frac{E_G(\infty)}{N} + \frac{\epsilon}{N^{\frac{2+R}{2}}} \quad (3.28)$$

für $0 \leq R \leq 1$ angewendet. In diesem Gesetz sind $E_G(\infty)/N$ und ϵ die zu bestimmen- den Unbekannten. Das asymptotische Verhalten von (3.28) stimmt mit dem bekannten Verhalten der ein- und zweidimensionalen Grenzfälle überein. In [39] wurde dasselbe Gesetz zur Extrapolation von Daten der exakten Diagonalisierung für das räumlich anisotrope zweidimensionale $s = \frac{1}{2}$ Heisenberg Modell genutzt.

Die Gitter mit $N = 16, 36$ zerfallen im Grenzfall $R = 0$ in vier Ketten mit vier Spins und in sechs Ketten mit sechs Spins. Im Unterschied dazu entstehen bei $R = 0$ zwei Ketten mit vier Spins, drei Ketten mit sechs Spins und vier Ketten mit acht Spins für $N = 8, 18$ und 32 , wodurch die Randeffekte stärker sind.

Die Ergebnisse der Extrapolation sind in Abbildung 3.2 zu sehen. In dieser und auch der Darstellung der Untergittermagnetisierung im Grundzustand sind die Extrapolationen der auf der Kante stehenden Quadratgitter mit ebenfalls auf der Kante stehenden Quadraten und die auf einer Ecke stehenden Gitter mit auf der Ecke stehenden Quadraten symbolisiert. Wie man in Abbildung 3.2 erkennen kann, unterscheiden sich die Ergebnisse der Extrapolationen nur geringfügig. Aufgrund der stärker werdenden vertikalen Bindung J_{\perp} zwischen den Ketten nimmt die Grundzustandsenergie ab,

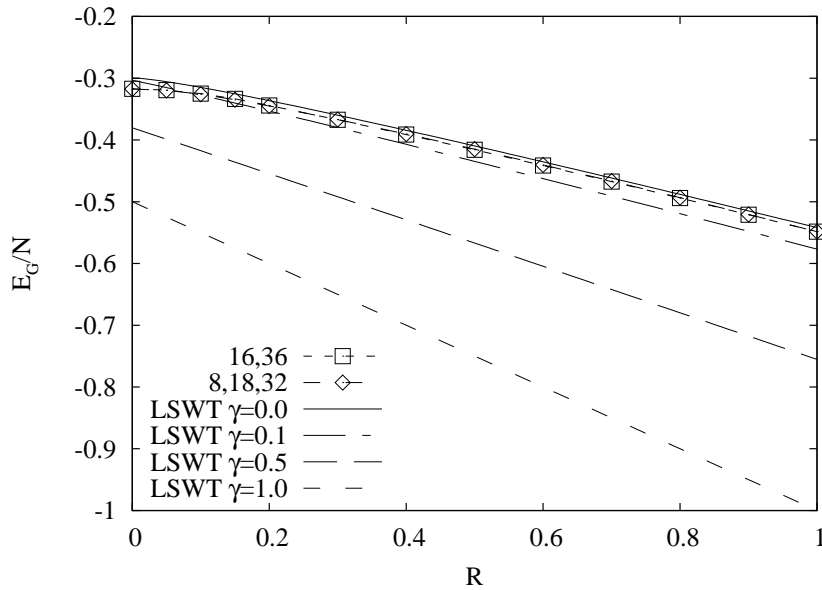


Abbildung 3.2.: Die Grundzustandsenergie pro Spin in Abhängigkeit des Parameters der räumlichen Anisotropie $R = J_{\perp}/J$. Die auf der Kante stehenden Quadrate symbolisieren die Extrapolationen der quadratischen Gitter mit $N = 16, 36$ und die auf der Ecke stehenden Quadrate, die Extrapolationen der Quadratgitter mit $N = 8, 18, 32$. Des Weiteren ist die Grundzustandsenergie der linearen Spinwellentheorie für verschiedene Werte des Austausch-Anisotropie-Parameters γ dargestellt.

denn es kommen zusätzliche Bindungen, die nicht frustrierend wirken, dazu. Neben den Resultaten der Extrapolation sind auch die Grundzustandsenergien, die mittels der linearen Spinwellentheorie (LSWT) für die Werte $\gamma = 0, 0.1, 0.5, 1$ des Parameters der Austausch-Anisotropie berechnet wurden, in Abbildung 3.2 gezeigt. Die Grenzfälle $\gamma = 0$ und $\gamma = 1$ repräsentieren zum einen das XY-Modell und zum anderen das Ising-Modell, bei dem die Grundzustandsenergie eine lineare Funktion des Parameters R ist. Für $\gamma = 0$ liefern die Extrapolationen und die lineare Spinwellentheorie gut übereinstimmende Grundzustandsenergien, wobei die größten Differenzen bei kleinen Werten von γ existieren. Die Verkleinerung von γ , beginnend von eins, entspricht einem Zulassen von Quantenfluktuationen und dem Vergrößern des Einflusses der Quantenfluktuationen. Die Quantenfluktuationen bewirken die stärkste Änderung der Grundzustandsenergie bei kleinen Werten von R .

Für die Extrapolation der Untergittermagnetisierung gilt die Annahme, dass im Grenzfall von $R = 0$ und $\gamma = 0$ ([110, 112]) folgendes Skalierungsgesetz anwendbar ist

$$m_{\text{UG}}^x{}^2(N) = m_{\text{UG}}^x{}^2(\infty) + \frac{\mu_1}{N^{\frac{1}{2}}} + \dots \quad (3.29)$$

Unter Verwendung von (3.29) erhält man die in Abbildung 3.3 gezeigten Resultate für die extrapolierte Untergittermagnetisierung $m_{\text{UG}} = \sqrt{m_{\text{UG}}^x{}^2 + m_{\text{UG}}^y{}^2} = \sqrt{2m_{\text{UG}}^x{}^2}$ in Abhängigkeit von R für $0 \leq R \leq 1$. Ebenso ist in Abbildung 3.3 die Darstellung

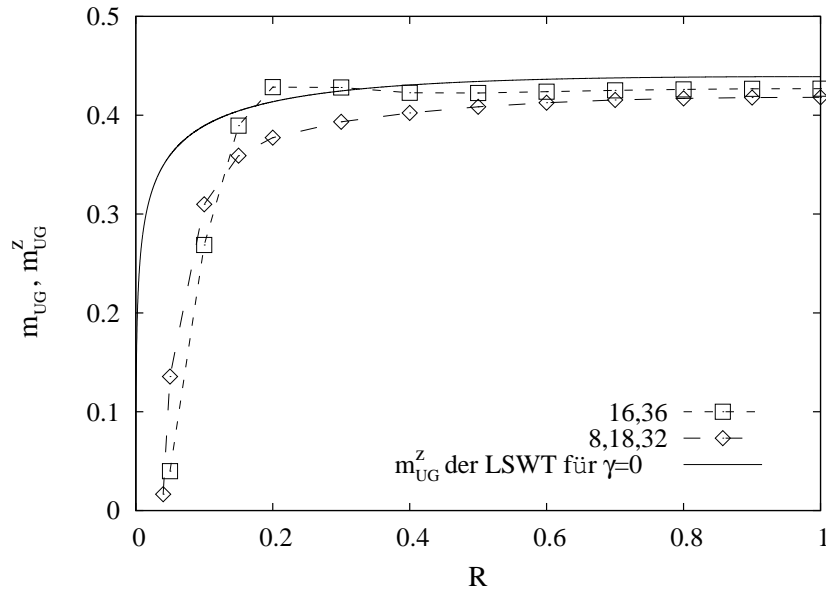


Abbildung 3.3.: Darstellung der extrapolierten Untergittermagnetisierung $m_{UG} = \sqrt{2m_{UG}^z}$ bei $T = 0$ in Abhängigkeit des Parameters der räumlichen Anisotropie $R = J_{\perp}/J$. Die auf der Kante stehenden Quadrate symbolisieren die Extrapolationen der quadratischen Gitter mit $N = 16, 36$ und die auf der Ecke stehenden Quadrate, die Extrapolationen der Quadratgitter mit $N = 8, 18, 32$. Mit der durchgezogenen Linie wird die Untergittermagnetisierung m_{UG}^z der linearen Spinwellentheorie (LSWT) dargestellt.

der Untergittermagnetisierung der linearen Spinwellentheorie für das XY-Modell, d.h. $\gamma = 0$, zu sehen. Im Gegensatz zur Grundzustandsenergie sind bei der Untergittermagnetisierung die Unterschiede bei den Extrapolationen der auf der Kante stehenden und den Extrapolationen der auf der Ecke stehenden Quadratgitter um einiges deutlicher. Die Unterschiede sind bei $R = 0.2$ bei den gezeigten Untergittermagnetisierungen am größten. Beide Extrapolationen weisen auf das Verschwinden der Magnetischen Fernordnung bei kleinen Werten des Parameters der räumlichen Anisotropie hin. Die qualitative Übereinstimmung beider Untergittermagnetisierungen mit der Untergittermagnetisierung m_{UG}^z der linearen Spinwellentheorie ist bei großen Werten von R am stärksten. Aus Abbildung 3.3 entsteht der Eindruck, als ob die Untergittermagnetisierung der linearen Spinwellentheorie bei $R = 0$ gegen Null geht, wogegen die Extrapolationen eher auf einen Wert $R > 0$ hindeuten. In [41] wurde das Heisenberg-Modell beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen unter Verwendung der Coupled-Cluster-Methode [29, 113–123] untersucht. Die Autoren von [41] fanden in Übereinstimmung mit anderen Methoden heraus, dass für Systeme mit $s = \frac{1}{2}$ eine unendlich kleine Bindung zwischen Ketten genügt, um Fernordnung zu erzeugen. Bei Systemen mit $s = 1$ ist hingegen eine endliche Bindung zwischen den Ketten notwendig, damit Fernordnung existieren kann. Neben unfrustrierten Systemen wurden in [41] auch frustrierte $s = \frac{1}{2}$ Systeme mit zusätzliche Wechselwirkungen zwischen übernächsten Nachbarn bei

den im eindimensionalen Grenzfall existierenden Ketten studiert. Im Fall von stärkerer Frustration entsteht dann ebenso wie bei $s = 1$ bei einer endlichen Kopplungsstärke zwischen den Ketten Fernordnung.

ZWEIDIMENSIONALE SYSTEME: DAS BOUNCE- UND DAS MAPLE-LEAF-GITTER

In zwei Dimensionen sind 1.) das Mermin-Wagner-Theorem [36], mit der Aussage, dass eine magnetische Ordnung bei Heisenberg-Antiferromagneten nur für Temperaturen $T = 0$ möglich ist 2.) die Existenz von magnetisch geordneten und magnetisch ungeordneten Gittern bei $T = 0$ sowie 3.) das Auftreten von Quantenphasenübergängen besonders interessant. Die meisten zweidimensionalen Gitter weisen einen geordneten Grundzustand auf. Ungeordnete Grundzustände sind für das Kagome- und das Star-Gitter zu erwarten. Sie werden durch konkurrierende Wechselwirkungen, die Frustration, in den Systemen hervorgerufen.

Elf Archimedische Gitter können in zwei Dimensionen genutzt werden, um eine Fläche ohne Lücken und ohne Überlappungen zu füllen. Diese elf Gitter, die aus identischen oder aus verschiedenen Polygonen bestehen, sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Einige Eigenschaften der Archimedischen Gitter findet man in Tabelle 4.1. Wie alle anderen in dieser Arbeit studierten Systeme zeichnen sich die elf Archimedischen Gitter dadurch aus, dass alle Plätze gleichwertig sind.

Sie wurden nach [124] zuerst von Johannes Kepler erläutert und veröffentlicht. Der Grundzustand der elf Archimedischen Gitter wurde für Spin- $\frac{1}{2}$ -Systeme in [47] untersucht. Wie in dieser Dissertation sowie in [76] gezeigt wurde, bestehen zwischen einigen dieser Gitter Verwandtschaften. Das heißt, das Weglassen bestimmter Bindungen in einem Gitter lässt ein anderes Gitter (eventuell verzerrt) entstehen.

In den folgenden Abschnitten steht der Hamilton-Operator (1.1) ohne ein von außen angelegtes Feld

$$H = \sum_{i < j}^N J_{i,j} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \quad (4.1)$$

beim Übergang zwischen zwei Archimedischen Gittern, dem Maple-Leaf- und dem Bounce-Gitter, im Mittelpunkt. Das Austauschintegral $J_{i,j}$ koppelt ausschließlich nächsten Nachbarn aneinander. Mittels der linearen Spinwellentheorie (LSWT) und der exakten Diagonalisierung werden die Grundzustandsenergie und als Ordnungsparameter die Untergittermagnetisierung im Grundzustand berechnet. Der Schwerpunkt dieser Untersuchungen liegt beim Übergang zwischen den Gittern, welcher bei $T = 0$ ein Quantenphasenübergang ist. Die Untersuchungen beschränken sich auf Spins mit der

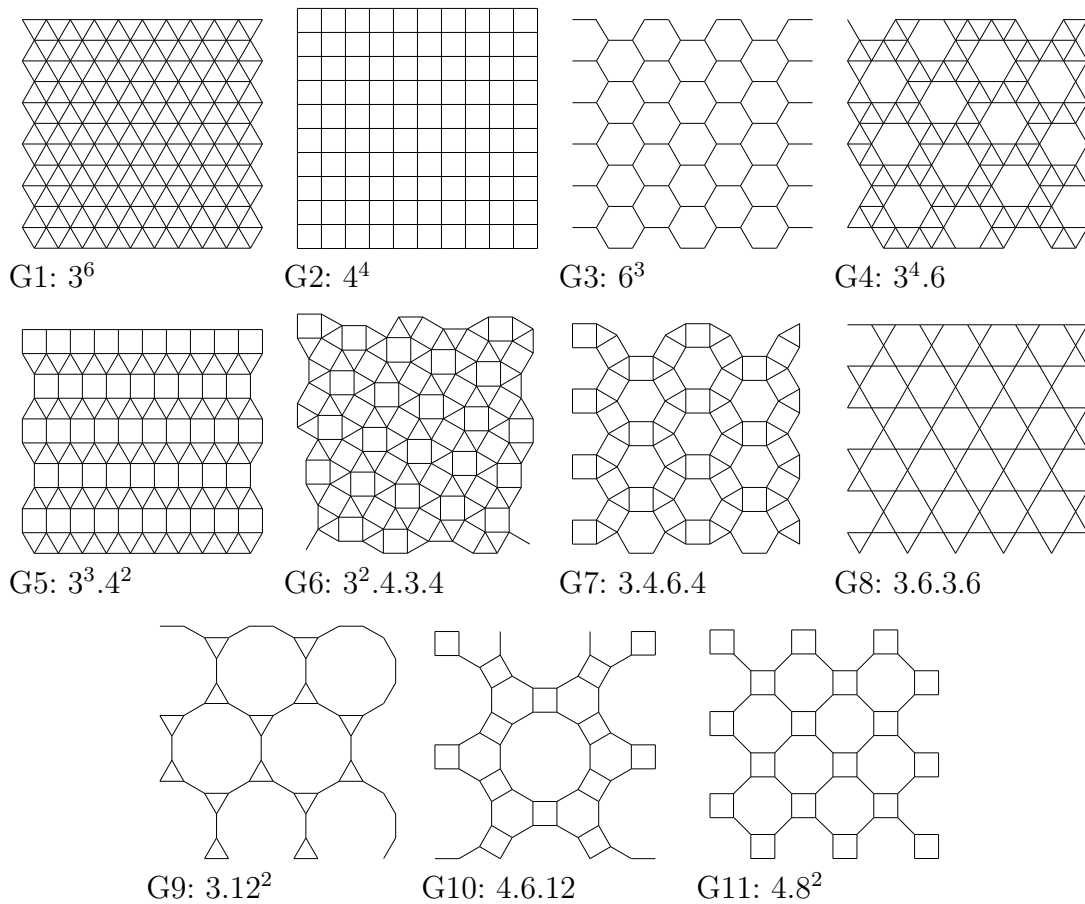


Abbildung 4.1.: Die elf Archimedischen Gitter (G1, ..., G11, hierbei steht das G für Gitter und die dem G folgende Zahl nummeriert das Gitter). Nicht alle Gitter besitzen gebräuchliche Namen. Aus diesem Grund sind sie mit einer mathematischen Bezeichnung $n_1^{e_1}.n_2^{e_2} \dots n_r^{e_r}$ aufgeführt. Dabei geben die n_i die Anzahl der Eckpunkte der Polygone und die Exponenten e_i die Anzahl der Polygone an, die an einen Punkt des Gitters grenzen. Gitter mit bekannten Namen sind G1: das Dreiecksgitter, G2: das Quadratgitter, G3: das Honigwabengitter, G4: das Maple-Leaf-Gitter, G5: das Trellis-Gitter, G6: das Shastri-Sutherland-Gitter und G8: das Kagomé-Gitter. Der Name Bounce-Gitter und Star-Gitter wurde in [124] für G7 und G9 vorgeschlagen. G10 und G11 werden in [76] als SHD-Gitter und CaVO-Gitter bezeichnet. (Graphiken aus [47])

Quantenzahl $s = \frac{1}{2}$.

4.1. DAS BOUNCE-GITTER

4.1.1. Lineare Spinwellentheorie

Ausgehend von der Energie des klassischen Analogons des Hamilton-Operators (4.1) wird nun die Methode der linearen Spinwellentheorie für das Bounce-Gitter angewendet, um die Grundzustandsenergie sowie die Magnetisierung für $T = 0$ zu berechnen.

Tabelle 4.1.: Eigenschaften der elf Archimedischen Gitter. Angegeben werden die Nummer des Gitters i (mit einem vorangestellten G, das für Gitter steht), die mathematische Notation, die Anzahl der nächsten Nachbarn (nN), die Anzahl der übernächsten Nachbarn (ünN), wobei der Manhattan-Abstand als Maß verwendet wurde, und der Name des Gitters.

| G_i | Notation | nN | ünN | Namen |
|-----------|-----------------------------|----------|----------|--|
| G1 | 3^6 | 6 | 12 | Dreiecksgitter |
| G2 | 4^4 | 4 | 8 | Quadratgitter |
| G3 | 6^3 | 3 | 6 | Honigwabengitter |
| G4 | $3^4.6$ | 5 | 9 | Maple-Leaf-Gitter |
| G5 | $3^3.4^2$ | 5 | 10 | Trellis-Gitter |
| G6 | $3^2.4.3.4$ | 5 | 10 | Shastry-Sutherland-Gitter |
| G7 | $3.4.6.4$ | 4 | 8 | Bounce-Gitter |
| G8 | $3.6.3.6$ | 4 | 8 | Kagomé-Gitter |
| G9 | 3.12^2 | 3 | 4 | Star-Gitter |
| G10 | $4.6.12$ | 3 | 5 | SHD-Gitter (d.h. square-hexagonal-dodecagonal) |
| G11 | 4.8^2 | 3 | 5 | CaVO-Gitter |

Die Energie des klassischen Modells wird bei der in Abbildung 4.2 gezeigten Einstellung der Spins eingenommen. Dabei sind die Spins eines Sechsecks antiparallel ausgerichtet und Spins auf benachbarten Sechsecken um $2\pi/3$ gedreht [47, 76].

Eine geometrische Einheitszelle des Bounce-Gitters ist in Abbildung 4.2 mit einer gepunkteten Linie umrissen. Sie enthält sechs Spins, die antiparallel zueinander ausgerichtet sind, und zwölf Bindungen.

Die Basisvektoren des Bounce-Gitters sind bei der gewählten Einheitszelle

$$\mathbf{a}_1 = (1 + \sqrt{3})c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{c_1}{2} \begin{pmatrix} 3 + \sqrt{3} \\ 1 + \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

wobei c_1 der Abstand zwischen zwei benachbarten Plätzen ist. Im Folgenden wird $c_1 = 1$ gesetzt.

Der Hamilton-Operator (4.1) wird zunächst wieder im Rahmen der Spinwellentheorie in N_{EZ} Operatoren H_n zerlegt. Die Operatoren H_n beschreiben die Wechselwirkungen in einer Zelle n , aus der die gesamte magnetische Struktur, welche im klassischen Modell besteht, aufgebaut werden kann. Die geometrische Einheitszelle aus Abbildung 4.2 ist als „magnetische“ Einheitszelle n verwendbar, da beim Übergang zu jeder benachbarten Zelle die klassischen Spins um den gleichen Winkel ($2\pi/3$) zu drehen sind. In Abbildung 4.3 sind zwölf ausgewählte, zu einer Einheitszelle gehörende, Bin-

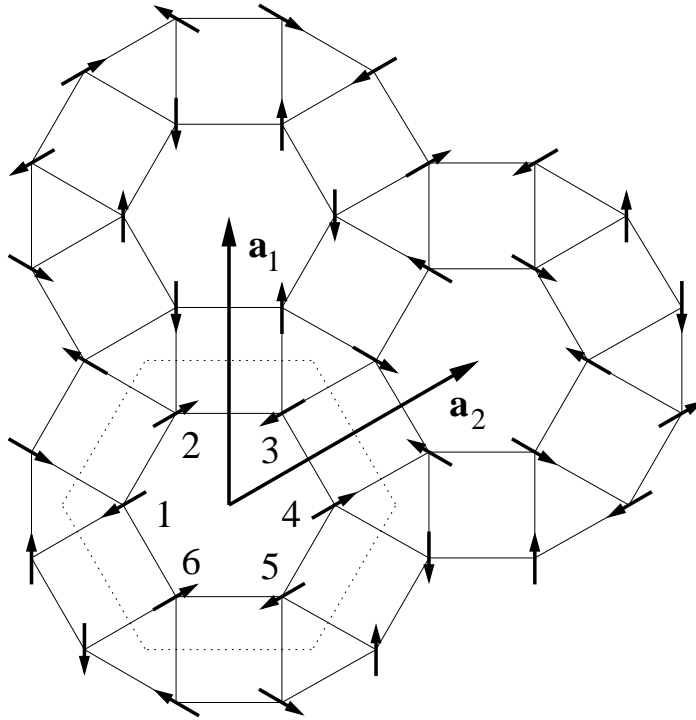


Abbildung 4.2.: Einstellungen der Spins des klassischen Analogons von (4.1) auf dem Bounce-Gitter. Spins eines Sechsecks sind antiparallel zueinander eingestellt. Der Winkel zwischen Spins auf benachbarten Sechsecken beträgt $2\pi/3$. Die Einheitszelle, welche durch die gepunktete Linie umrissen ist, enthält die mit Zahlen nummerierten sechs Spins. $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}+1)(0, 1)$ und $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}(3 + \sqrt{3}, 1 + \sqrt{3})$ bezeichnen die Basisvektoren des Bounce-Gitters.

dungen dargestellt. Die Vektoren \mathbf{d}_j ($j = 1, 2, \dots, 6$) sind

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, & \mathbf{d}_2 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, & \mathbf{d}_3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{d}_4 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{d}_5 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ und } & \mathbf{d}_6 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Unter Verwendung dieser „magnetische“ Einheitszelle lässt sich der Hamilton-Operator (4.1) als Summe

$$H = \sum_n^{N_{EZ}} H_n \quad (4.4)$$

aufschreiben, wobei die Summanden durch

$$\begin{aligned}
H_n = & \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}+\mathbf{d}_1} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}+\mathbf{d}_2} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n1}+\mathbf{d}_3} \\
& + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}+\mathbf{d}_4} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}+\mathbf{d}_2} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n2}+\mathbf{d}_5} \\
& + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}+\mathbf{d}_6} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}+\mathbf{d}_3} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n3}+\mathbf{d}_5} \\
& + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n4}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n4}-\mathbf{d}_1} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n4}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n4}+\mathbf{d}_6} + \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n5}} \mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{n5}-\mathbf{d}_4}
\end{aligned} \tag{4.5}$$

gegeben sind. Hier ist N_{EZ} die Anzahl der Einheitszellen und $\mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{ni}}$ der Spinoperator des Spins i ($i = 1, 2, \dots, 6$) in der Einheitszelle n . $\mathbf{s}'_{\mathbf{R}_{ni}+\mathbf{d}_j}$ ist der Spinoperator eines Spins, der mit dem Spin i wechselwirkt und die Koordinaten $\mathbf{R}_{ni} + \mathbf{d}_j$ besitzt. Mit \mathbf{R}_{ni} wird der Vektor bezeichnet, welcher vom Ursprung zum Platz i in der n -ten Einheitszelle geht.

Als Nächstes werden lokale Koordinatentransformationen¹ vorgenommen, so dass alle Spins in z -Richtung zeigen. Dies kann durch die Transformation:

$$s_{\beta}^{x'} = s_{\beta}^x \cos \theta - s_{\beta}^z \sin \theta \tag{4.6}$$

$$s_{\beta}^{y'} = s_{\beta}^y \tag{4.7}$$

$$s_{\beta}^{z'} = s_{\beta}^x \sin \theta + s_{\beta}^z \cos \theta \tag{4.8}$$

erreicht werden. Der Index β steht hier für \mathbf{R}_{ni} oder $\mathbf{R}_{ni} + \mathbf{d}_j$. Um die Spinoperatoren mithilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (α_{β}^{\dagger} und α_{β}) darzustellen, wird die Holstein-Primakoff-Transformation [125] in linearer Näherung

$$s_{\beta}^x = \sqrt{\frac{s}{2}} (\alpha_{\beta} + \alpha_{\beta}^{\dagger}) \tag{4.9}$$

$$s_{\beta}^y = \sqrt{\frac{s}{2}} (\alpha_{\beta}^{\dagger} - \alpha_{\beta}) \tag{4.10}$$

$$s_{\beta}^z = s - \alpha_{\beta}^{\dagger} \alpha_{\beta} \tag{4.11}$$

angewendet. Die Anzahl der Boseoperatoren entspricht der Anzahl der Spins, die die magnetische Einheitszelle enthält. Die Fouriertransformation

$$\alpha_{\beta} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{EZ}}}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\beta}) \alpha_{i\mathbf{k}} \tag{4.12}$$

$$\alpha_{\beta}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{EZ}}}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(+i\mathbf{k}\boldsymbol{\beta}) \alpha_{i\mathbf{k}}^{\dagger} \tag{4.13}$$

¹Diese Transformationen können als Drehungen von kartesischen Koordinatensystemen angesehen werden. In Anhang A findet man dazu nähere Erläuterungen.

überführt den Hamilton-Operator in

$$H = -9s^2 N_{\text{EZ}} + s \sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} \quad (4.14)$$

mit

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{k}} = & 3(\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{3\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{3\mathbf{k}} + \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{4\mathbf{k}} + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{5\mathbf{k}} + \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{6\mathbf{k}}) \\ & - (\gamma_{\mathbf{k}_1} (\alpha_{1\mathbf{k}} \alpha_{2-\mathbf{k}} + \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger) + \gamma_{\mathbf{k}_3} (\alpha_{1\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}} + \alpha_{3\mathbf{k}} \alpha_{4-\mathbf{k}}) \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_4} (\alpha_{2\mathbf{k}} \alpha_{3-\mathbf{k}} + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{6-\mathbf{k}}^\dagger) + \text{h.k.}) \\ & + \frac{1}{4} (\gamma_{\mathbf{k}_2} [\alpha_{1\mathbf{k}} \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{2\mathbf{k}} \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{1\mathbf{k}} \alpha_{5-\mathbf{k}} + \alpha_{2\mathbf{k}} \alpha_{4-\mathbf{k}})] \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_5} [\alpha_{2\mathbf{k}} \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{3\mathbf{k}} \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{2\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}} + \alpha_{3\mathbf{k}} \alpha_{5-\mathbf{k}})] \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_6} [\alpha_{3\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{4\mathbf{k}} \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{3\mathbf{k}} \alpha_{1-\mathbf{k}} + \alpha_{4\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}})] + \text{h.k.}) . \quad (4.15) \end{aligned}$$

Die Abkürzung h.k. steht für die zu den aufgeführten Operatoren hermitesch konjugierten Operatoren. Zur Umformung wurde des Weiteren die Darstellung der Delta-Distribution

$$\sum_{ni}^{N_{\text{EZ}}} \exp \{i\mathbf{R}_{ni}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\} = N_{\text{EZ}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (4.16)$$

genutzt. Die Koeffizienten $\gamma_{\mathbf{k}_j}$ stehen für die Funktionen $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{d}_j)$. Der Hamilton-Operator (4.15) kann nun mit der Bogoljubov-Transformation diagonalisiert werden. In der Dissertation [126] werden an einem Beispiel vier verschiedene Arten dieser Transformation aufgezeigt. Colpa beschrieb in [127] eine weitere Methode der Diagonalisierung von Hamilton-Operatoren, die nur Produkte von zwei Bose-Operatoren enthalten. Um diese Methode anzuwenden, ist $H_{\mathbf{k}}$ (Gleichung (4.15)) in

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{k}} = & \frac{1}{2} (3[\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{1-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{2-\mathbf{k}}^\dagger \\ & + \alpha_{3\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{3\mathbf{k}} + \alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{3-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{4\mathbf{k}} + \alpha_{4-\mathbf{k}} \alpha_{4-\mathbf{k}}^\dagger \\ & + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{5\mathbf{k}} + \alpha_{5-\mathbf{k}} \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{6\mathbf{k}} + \alpha_{6-\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}}^\dagger] \\ & - [\gamma_{\mathbf{k}_1} (\alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger) + \gamma_{\mathbf{k}_1}^* (\alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{4-\mathbf{k}}^\dagger) \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_3} (\alpha_{6-\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{4-\mathbf{k}} \alpha_{3\mathbf{k}}) + \gamma_{\mathbf{k}_3}^* (\alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{6\mathbf{k}} + \alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{4\mathbf{k}}) \\ & + \gamma_{\mathbf{k}_4} (\alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{6-\mathbf{k}}^\dagger) + \gamma_{\mathbf{k}_4}^* (\alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{3\mathbf{k}} + \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger) + \text{h.k.}] \end{aligned}$$

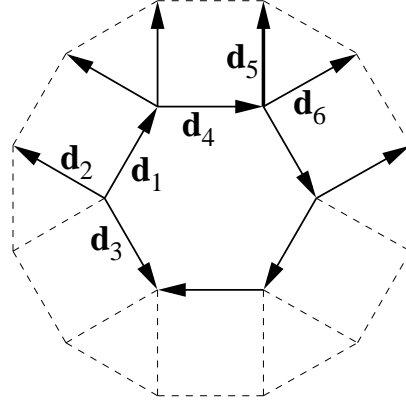


Abbildung 4.3.: Die zwölf verwendeten Bindungen der magnetischen Einheitszelle des Bounce-Gitters sind mit Vektoren abgebildet. Sechs Vektoren sind mit den \mathbf{d}_j s aus (4.3) identifiziert. Mit den gestrichelten Linien werden weitere Bindungen des Bounce-Gitters angedeutet.

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{4} \{ \gamma_{\mathbf{k}_2} [\alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{4\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} - 3(\alpha_{5-\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{4-\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}})] \\
& + \gamma_{\mathbf{k}_2}^* [\alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{4-\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{5\mathbf{k}} + \alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{4\mathbf{k}})] \\
& + \gamma_{\mathbf{k}_5} [\alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{5\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{3\mathbf{k}} - 3(\alpha_{6-\mathbf{k}} \alpha_{2\mathbf{k}} + \alpha_{5-\mathbf{k}} \alpha_{3\mathbf{k}})] \\
& + \gamma_{\mathbf{k}_5}^* [\alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{5-\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{2-\mathbf{k}} \alpha_{6\mathbf{k}} + \alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{5\mathbf{k}})] \\
& + \gamma_{\mathbf{k}_6} [\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{3\mathbf{k}} + \alpha_{6\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{4\mathbf{k}} - 3(\alpha_{1-\mathbf{k}} \alpha_{3\mathbf{k}} + \alpha_{6-\mathbf{k}} \alpha_{4\mathbf{k}})] \\
& + \gamma_{\mathbf{k}_6}^* [\alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{1-\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{4-\mathbf{k}} \alpha_{6-\mathbf{k}}^\dagger - 3(\alpha_{3-\mathbf{k}} \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{4-\mathbf{k}} \alpha_{6\mathbf{k}})] + \text{h.k.} \} \quad (4.17)
\end{aligned}$$

umzuformen. Dabei wird der Kommutator (3.8) und die Symmetrie-Relation (3.11) benutzt. In der Schreibweise von Gleichung (4.17) tauchen im Hamilton-Operator nur noch die Produkte

$$\alpha_{i\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{j\mathbf{k}}, \quad \alpha_{i\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{j-\mathbf{k}}^\dagger, \quad \alpha_{i-\mathbf{k}} \alpha_{j\mathbf{k}} \quad \text{und} \quad \alpha_{i-\mathbf{k}} \alpha_{j-\mathbf{k}}^\dagger$$

auf, wobei alle möglichen Kombinationen von $i = 1, 2, \dots, 6$ und $j = 1, 2, \dots, 6$ zugelassen sind. Der Hamilton-Operator (4.17) lässt sich in die Form

$$H_{\mathbf{k}} = \mathbf{a}^\dagger \mathcal{D} \mathbf{a} \quad \text{mit} \quad \mathbf{a}^\dagger = (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{-\mathbf{k}}) \quad \text{und} \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

bringen. Hier ist \mathbf{a}^\dagger ein Zeilen- und \mathbf{a} ein Spaltenvektor. Jeder dieser Vektoren besteht aus zwölf Elementen. Die Zeilenvektoren $\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ und $\alpha_{-\mathbf{k}}$ besitzen dementsprechend die sechs Operatoren $\alpha_{i\mathbf{k}}^\dagger$ und $\alpha_{j-\mathbf{k}}$ als Elemente und die Spaltenvektoren $\alpha_{\mathbf{k}}$ und $\alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger$ die

sechs Operatoren $\alpha_{i\mathbf{k}}$ und $\alpha_{j-\mathbf{k}}^\dagger$ aus (4.17). Die zwölf-reihige quadratische Matrix

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 \\ \Delta_3 & \Delta_4 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

ist hermitesch. Zur Diagonalisierung des Hamilton-Operators (4.17) kann \mathcal{D} in

$$\mathcal{D}' = \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 \\ -\Delta_3 & -\Delta_4 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

überführt werden. Die Eigenwerte von \mathcal{D}' sind die Dispersionsrelationen $\omega_{i\mathbf{k}}$. Mit den Dispersionsrelationen wird die Grundzustandsenergie nach

$$E_G/N = -\frac{3}{2}s(s+1) + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1}^6 \frac{\omega_{i\mathbf{k}}}{2} \quad (4.21)$$

berechnet. Die Untergittermagnetisierung ist im Grundzustand

$$m_{\text{UG}}^z = \langle \psi_G | S_{\text{UG}}^z | \psi_G \rangle = s - \frac{6}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_G | \alpha_{i\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{i\mathbf{k}} | \psi_G \rangle. \quad (4.22)$$

Zur Bestimmung von $\langle \psi_G | a_{i\mathbf{k}}^\dagger a_{i\mathbf{k}} | \psi_G \rangle$ kann

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{c} = \mathcal{T} \mathbf{a} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

und damit

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{T}^{-1} \mathbf{a} = \mathcal{T}^{-1} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

herangezogen werden. Angewendet auf den Grundzustand geben lediglich die Terme, welche die Produkte $\gamma_{i\mathbf{k}} \gamma_{i-\mathbf{k}}^\dagger$ enthalten, einen Beitrag. Die Matrix \mathcal{T}^{-1} setzt sich aus den Eigenvektoren von \mathcal{D}' zusammen. Die Eigenvektoren sind mit einem Faktor zu versehen, so dass für die Vektoren $\mathbf{u}_{l\mathbf{k}}$ und $\mathbf{v}_{l\mathbf{k}}$ des l -ten Eigenwerts ($l = 1, \dots, 12$), die durch

$$\begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 \\ -\Delta_3 & -\Delta_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{l\mathbf{k}} \\ \mathbf{v}_{l\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \omega_{l\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{l\mathbf{k}} \\ \mathbf{v}_{l\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

festgelegt sind, gilt

$$\mathbf{u}_{l\mathbf{k}} \mathbf{u}_{l\mathbf{k}}^* - \mathbf{v}_{l\mathbf{k}} \mathbf{v}_{l\mathbf{k}}^* = 1. \quad (4.26)$$

Um die Summe über \mathbf{k} nach (3.20) in Integrale zu überführen, ist das Integrationsgebiet

zu ermitteln. Die Basisvektoren des reziproken Gitters ergeben sich aus (3.14) zu

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3 + \sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3 + \sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Damit erhält man für das Volumen der ersten Brillouin-Zone

$$V_{\text{BRZ}} = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}(1 + \sqrt{3})^2}. \quad (4.28)$$

Die Integration braucht aufgrund der Symmetrie der Grundzustandsenergie sowie der Untergittermagnetisierung nur über eine Hälfte der ersten Brillouin-Zone ausgeführt werden. Wählt man die rechte Hälfte ($k_x > 0$), der in Abbildung 4.4 dargestellten Brillouin-Zone, so ergibt sich

$$\int_{V_{\text{BRZ}}} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = 2 \int_0^{\frac{2\pi}{\sqrt{3}(1+\sqrt{3})}} dk_x \int_{-\frac{4\pi}{3(1+\sqrt{3})} + \frac{k_x}{\sqrt{3}}}^{+\frac{4\pi}{3(1+\sqrt{3})} - \frac{k_x}{\sqrt{3}}} dk_y f(k_x, k_y). \quad (4.29)$$

Die Integrale können mit der Gauß-Legendre-Quadratur berechnet werden². Um genauere Werte für die Integrale zu erhalten, wurde die auf das Intervall $[-1, +1]$ transformierte halbe Brillouin-Zone in n -Stücke zerteilt und die n -Integrale wiederum auf das Intervall $[-1, +1]$ abgebildet.

Die Grundzustandsenergie (4.21) und die Untergittermagnetisierung (4.22) des Bounce-Gitters sind $E_G/N = -0.543$ und $m^z = 0.180$. Das unfrustrierte Quadratgitter besitzt in der linearen Spinwellentheorie die Grundzustandsenergie $E_G/N = -0.657$ sowie eine Untergittermagnetisierung von $m^z = 0.303$. Da das Bounce-Gitter und das Quadratgitter dieselbe Anzahl der nächsten Nachbarn haben, können sowohl die erhöhte Grundzustandsenergie als auch die kleinere Untergittermagnetisierung dem Einfluss der Frustration im Bounce-Gitter zugeschrieben werden.

4.2. DAS MAPLE-LEAF-GITTER

In diesem Abschnitt wird das Maple-Leaf-Gitter vorgestellt, welches in das Bounce-Gitter durch das Weglassen einiger Bindungen übergeht. Resultate für das Maple-Leaf-Gitter sind in [51] bereits publiziert worden.

Das Entfernen eines jeden siebenten Gitterplatzes lässt das Maple-Leaf-Gitter aus dem Dreiecksgitter entstehen. Den Namen Maple-Leaf verdankt das Gitter D. D. Betts, der in [129] Ahornblätter auf den Eckpunkten der Polygone platzierte. Die Orientierung der Blätter ändert sich von einem Eckpunkt der Hexagone zum nächsten um 60° . Dadurch zeigen die Blattstiele zum Mittelpunkt der Sechsecke. Es existiert als einziges Archimedisches Gitter in einer links- und einer rechtshändigen Variante.

²In Anhang B ist ein Programm zu finden, welches Octave [128] zur Berechnung der Grundzustandsenergie und der Untergittermagnetisierung nutzt.

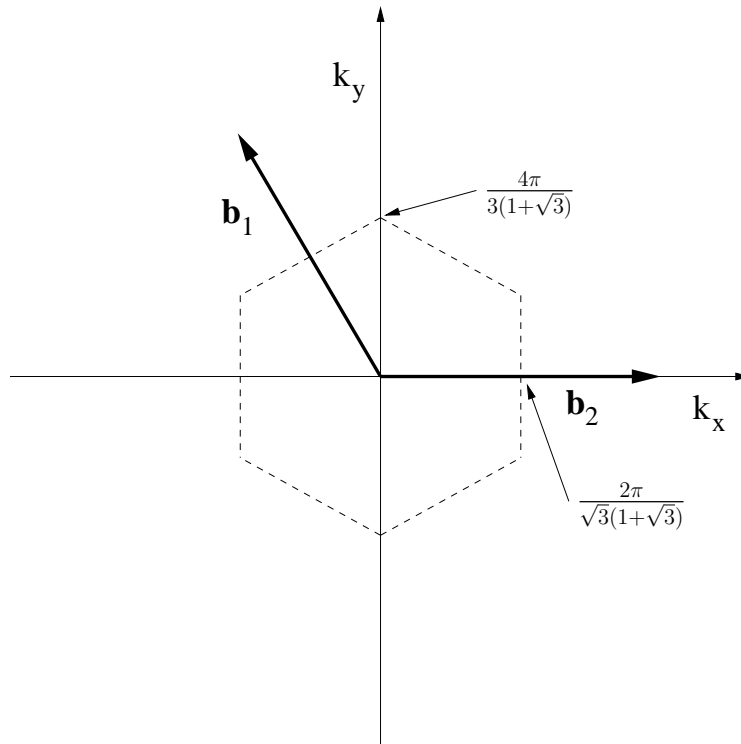


Abbildung 4.4.: Die erste Brillouin-Zone des Bounce-Gitters. Die Vektoren \mathbf{b}_1 und \mathbf{b}_2 sind die Basisvektoren des reziproken Gitters. Die angegebenen Quotienten sind die Schnittpunkte der ersten Brillouin-Zone mit den Koordinatenachsen.

Untersuchungen der magnetischen Ordnung des Grundzustandes findet man in [47, 51, 76, 126]. In Abbildung 4.5 sind die Spineinstellungen des klassischen Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Maple-Leaf-Gitter gezeigt. Die gestrichelten und die durchgezogenen Bindungen sind beim Maple-Leaf-Gitter gleich stark. Im Bounce-Gitter gibt es keine gestrichelten Bindungen J_M . Wie beim Bounce-Gitter sind alle Spins eines Sechsecks beim benachbarten Sechseck um $2\pi/3$ gedreht. Im Unterschied zum Bounce-Gitter können die Spins auf einem Sechseck zwei Einstellungen einnehmen, die zur klassischen Energie führen. Der Winkel von benachbarten Spins auf einem Sechseck kann $5\pi/6$ oder $7\pi/6$ betragen. In Abbildung 4.5 ist die Darstellung für einen Winkel von $5\pi/6$ zwischen Spins auf den Sechsecken zu finden. Nach [51] beträgt in der Näherung der linearen Spinwellentheorie die Grundzustandsenergie $E_G/N = -0.512$ und die Untergittermagnetisierung $m^z = 0.154$. Die Bindung J_M verstärkt die Frustration im Maple-Leaf-Gitter im Vergleich zum Bounce-Gitter. Aus diesem Grund ist die Grundzustandsenergie größer und die Grundzustandsmagnetisierung kleiner.

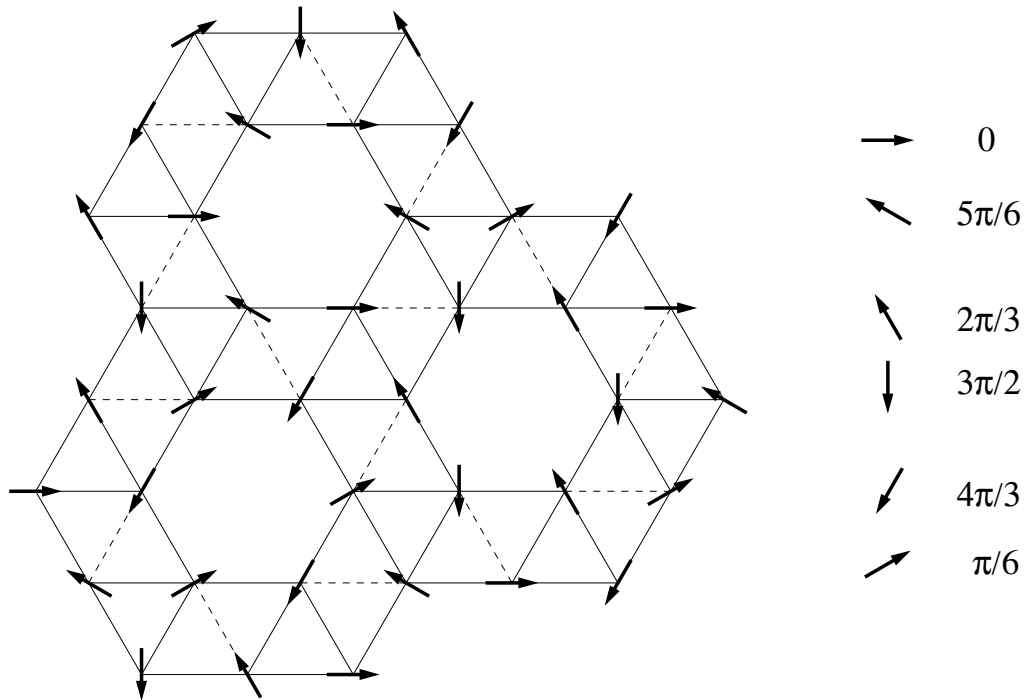


Abbildung 4.5.: Einstellungen der Spins des klassischen Analogons von Gleichung (4.1) auf dem Maple-Leaf-Gitter. Beim Maple-Leaf-Gitter sind die durch gestrichelte (J_M) und durchgezogene Linien gekennzeichneten Bindungen gleich stark. Rechts neben dem Gitter sind die Spins und der eingenommene Winkel zu einem in der horizontalen (Winkel 0) liegenden Spin abgebildet. Setzt man die gestrichelte Linie Null, so erhält man das Bounce-Gitter.

4.3. ÜBERGANG VOM MAPLE-LEAF-GITTER ZUM BOUNCE-GITTER

Wenn man die in Abbildung 4.5 gestrichelten Bindungen $J_M = 0$ setzt oder J_M klein ist, erhält man das Bounce-Gitter. Bei $J_M = 1$ wird exakt das Maple-Leaf-Gitter eingenommen. Die Variation der gestrichelten Bindungen ermöglicht ein Studium des Übergangs vom Maple-Leaf-Gitter zum Bounce-Gitter. Bei diesem Übergang ändert sich die Koordinationszahl von $z_1 = 5$ auf $z_1 = 4$.

Die Berechnung der klassischen Energie ist in [126] zu finden; danach gilt

$$\begin{aligned} \frac{E}{Ns^2} &= J \cos(\alpha) + \frac{J}{3} [\cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{Q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))] \\ &+ \frac{J_M}{6} [\cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_1 + \alpha) + \cos(\mathbf{Q}\mathbf{a}_2 - \alpha) + \cos(\mathbf{Q}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) - \alpha)], \quad (4.30) \end{aligned}$$

wobei die geometrische Elementarzelle des Maple-Leaf-Gitters durch die Vektoren

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{7}}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}_2 = \sqrt{7} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

aufgespannt wird. Diese Energie wird für

$$\mathbf{Q}_1 = \frac{2\pi}{3\sqrt{7}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \alpha_1 = \frac{5\pi}{6} \quad (4.32)$$

$$\text{sowie für } \mathbf{Q}_2 = \frac{2\pi}{3\sqrt{7}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \alpha_2 = \frac{7\pi}{6} \quad (4.33)$$

minimal. Mit dem Einsetzen von $\mathbf{Q}_1 \mathbf{a}_1 = 2\pi/3$ und $\mathbf{Q}_1 \mathbf{a}_2 = 4\pi/3$ in (4.30) ist die klassische Energie

$$\frac{E}{Ns^2} = J(\cos(\alpha) - \frac{1}{2}) - \frac{J_M}{4}[\cos(\alpha) + \sqrt{3}\sin(\alpha)] . \quad (4.34)$$

Das Nullsetzen der nach α differenzierten Energie (4.34) führt zu der Beziehung

$$\tan(\alpha) = \frac{\sqrt{3}J_M}{J_M - 4J} , \quad (4.35)$$

aus der der Winkel α für die entsprechenden Werte von J und J_M bestimmt werden kann.

Im Grenzwert sehr starker gestrichelter Bindungen ist ein Dimer-Zustand zu erwarten. Dieser Zustand ist ein Produkt-Zustand bestehend aus Singulett, welche durch die Spins gebildet werden, die über die Bindung J_M aneinander koppeln. Einen orthogonalen Dimer-Zustand findet man beim Shastry-Sutherland-Modell, das in Abbildung 4.6 dargestellt ist. Sind die in dieser Abbildung gestrichelten Bindungen J_2 null, so wird das

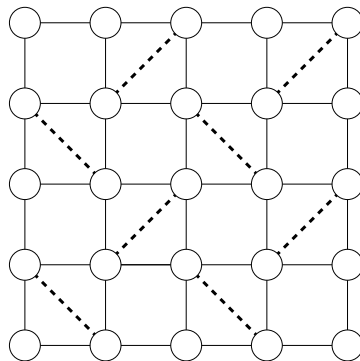


Abbildung 4.6.: Das Shastry-Sutherland-Modell. Die Kreise symbolisieren Plätze an denen die Spins sitzen. Mit den gestrichelten Linien werden die in der Stärke veränderlichen Bindungen J_2 gekennzeichnet, wohingegen durchgezogene Linien für konstant starke Bindungen J_1 stehen.

Quadratgitter beschrieben. Bei $J_2/J_1 = 1$ erhält man das Shastry-Sutherland-Gitter G6 aus Abbildung 4.1, wobei mit J_1 die in Abbildung 4.6 mit durchgezogenen Linien gekennzeichneten Bindungen zu den nächsten Nachbarn bezeichnet werden. Die bei $T = 0$ bestehende Néel-Ordnung [122] wird mit zunehmendem J_2/J_1 geschwächt bis

sie zwischen $J_2/J_1 = 1.14$ und $J_2/J_1 = 1.39$ verschwindet. Der orthogonale Dimer-Zustand wird bei $J_2/J_1 \approx 1.477$ Grundzustand. Die Phase zwischen der Nèel- und der Dimer-Phase weist keine Anzeichen von Ordnung auf. In [122] wurde die Coupled-Cluster-Methode zur Berechnung von Grundzustandseigenschaften benutzt.

Mithilfe der exakten Diagonalisierung wird nun die Veränderung magnetischer Eigenschaften beim Übergang des Maple-Leaf-Gitters zum Bounce-Gitter untersucht.

Wie man in [51] lesen kann, besitzen ausschließlich Maple-Leaf-Gitter, bei denen die Anzahl der Spins ein Vielfaches von $N = 18$ im Bereich der natürlichen Zahlen ist, die volle p6-Symmetrie des unendlichen Maple-Leaf-Gitters.

Die zwei in dieser Arbeit untersuchten Gitter mit $N = 18$ und $N = 36$ sind in Abbildung 4.7 zu sehen. Sind die gestrichelten Bindungen (J_M) null, so sind die dargestellten Gitter Bounce-Gitter. Bei $0 < J_M < \infty$ sind es Maple-Leaf-Gitter.

4.3.1. Grundzustandsenergie

In Abbildung 4.8 ist die Grundzustandsenergie des Gitters mit $N = 18$ sowie $N = 36$ in Abhängigkeit des Parameters J_M zu finden. Das Gitter mit achtzehn Spins konnte ohne die Verwendung von Symmetrien diagonalisiert werden. Beim Gitter mit sechsunddreißig Spins war die Verwendung von zwölf Symmetrien notwendig. Mit Symmetrien werden Symmetrieoperatoren P_i bezeichnet für die gilt

$$P_i |\psi_G(k_m)\rangle = \exp\left(i\frac{2\pi k_m}{l}\right) |\psi_G(k_m)\rangle, \quad (4.36)$$

wobei k_m den Eigenwert und den dazugehörigen Hilbertraum festlegt. Mit l wird in (4.36) die Zyklenlänge der Operatoren bezeichnet. Die vorgestellten Ergebnisse wurden für $k_m = 0$ berechnet. Für das Gitter mit $N = 18$ konnte nachgewiesen werden, dass der Grundzustand unabhängig vom Parameter J_M für $k_m = 0$ berechnet werden kann, was die Vermutung nahelegt, dass bei $N = 36$ der Grundzustand ebenso für $k_m = 0$ zu finden ist.

Auch die Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie (LSWT) sind in Abbildung 4.8 dargestellt. Mit zunehmender Systemgröße nähern sich die Energien den Energien der linearen Spinwellentheorie an. Die Grundzustandsenergie nimmt bis $J_M \approx 1$ kontinuierlich zu und wird danach wieder kleiner. Die Zunahme der Energie kann der mit der Bindung J_M zusätzlich ins System gebrachten größer werdenden Frustration zugeschrieben werden. Bei $J_M \approx 1.5$ ist der Übergang zur Dimer-Phase, die sich durch eine lineare Abnahme der Energie manifestiert. Der Übergang verschiebt sich bei $N = 36$ zu einem kleineren Wert als bei $N = 18$. In der Dimer-Phase ist die Grundzustandsenergie dividiert durch die Anzahl der Spins unabhängig von der Systemgröße.

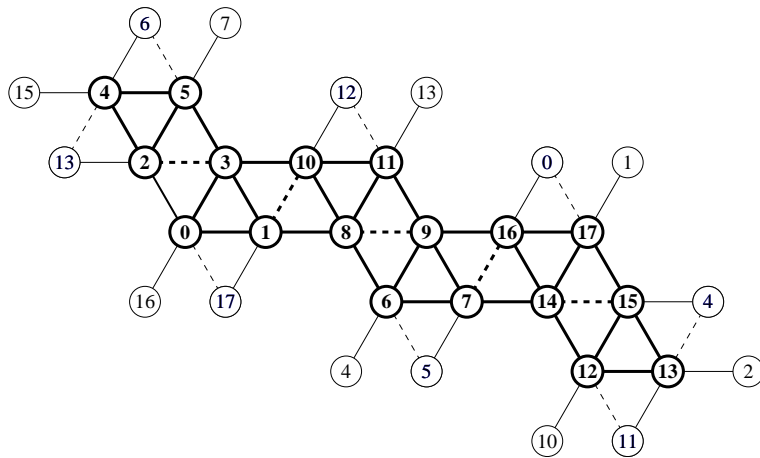
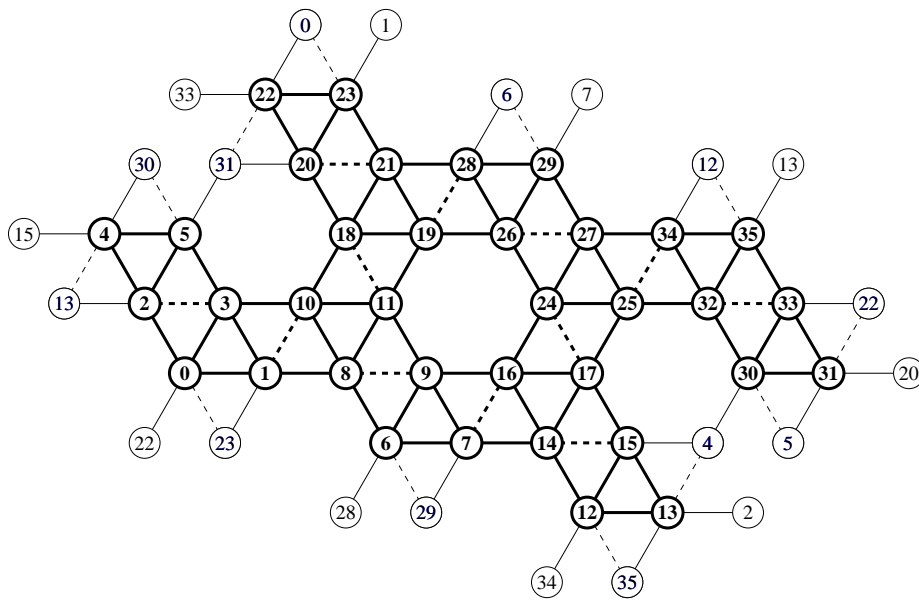
(a) $N = 18$ (b) $N = 36$

Abbildung 4.7.: Das Maple-Leaf-Gitter mit (a) $N = 18$ und (b) $N = 36$ Spins. Die dicken durchgezogenen und gestrichelten Linien (J_M) sind die Bindungen innerhalb der endlichen Gitter, wohingegen die dünnen durchgezogenen und gestrichelten Linien (J_M) die Bindungen symbolisieren, die für die periodischen Randbedingungen stehen. Die Zahlen in den Kreisen nummerieren die Spins (von null beginnend in (a) bis 17 und in (b) bis 35).

4.3.2. Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei $T = 0$

Zunächst werden die aus der exakten Diagonalisierung gewonnenen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Gitters mit $N = 18$ und $N = 36$ in Tabelle 4.2 und Tabelle 4.3 vorgestellt. Bei $J_M = 1.48$ wird deutlich, dass im Fall von $N = 18$ die Spins 0 und 17

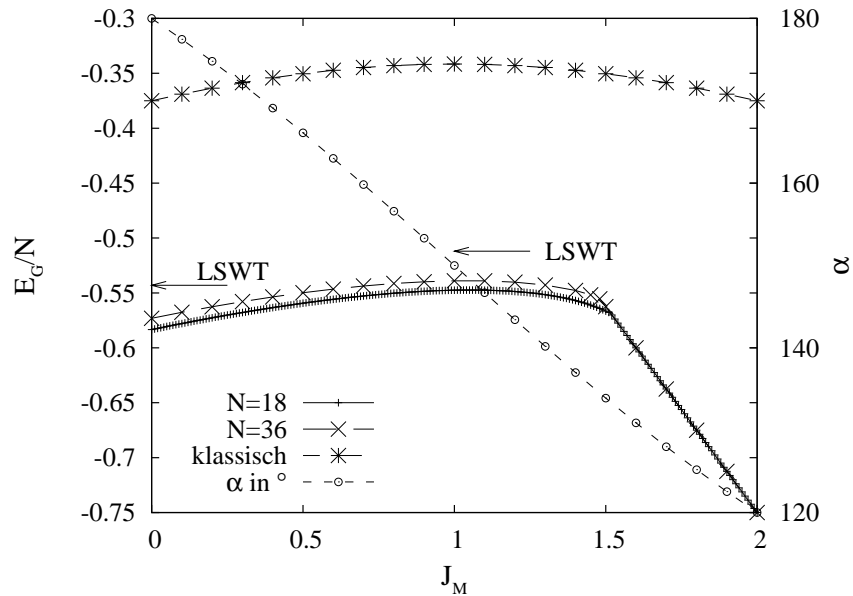


Abbildung 4.8.: Für das Gitter mit $N = 18$ und $N = 36$ Spins wird in (a) Die Grundzustandsenergie E_G dividiert durch die Anzahl der Spins N in Abhängigkeit vom Parameter J_M , der das Bounce-Gitter ($J_M = 0$) in das Maple-Leaf-Gitter ($J_M = 1$) überführt, dargestellt. Des Weiteren wird in (a) die klassische Energie sowie der bei \mathbf{Q}_2 eingenommene Winkel α gezeigt.

über J_M aneinander gekoppelt sind und im Fall von $N = 36$ Spin 0 mit Spin 23 über J_M wechselwirken. Diese Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sind die Stärksten. In der Dimer-Phase nehmen sie den Wert -0.75 an und alle anderen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sind null. Um die Werte der über J_M gekoppelten Spins in den Tabellen hervorzuheben, sind sie fett gedruckt. Im Gegensatz zu den anderen nächsten Nachbarn sind die über J_M gebundenen Spins bei $J_M = 0, 0.5$ ferromagnetisch zueinander ausgerichtet. Beim Maple-Leaf-Gitter ($J_M = 1$) sind $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_{17,23} | \psi_G \rangle$ schwächer als im Bounce-Gitter ($J_M = 0$) und bei $N = 18$ noch ferromagnetisch korreliert, wohingegen bei $N = 36$ bereits die in der Dimer-Phase antiferromagnetischen Einstellungen eingenommen werden. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ändern sich beim kleinen Gitter zwischen $1.51 < J_M < 1.52$ und beim großen zwischen $1.48 < J_M < 1.50$ drastisch.

In der graphischen Darstellung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit vom Abstand $r_{0,i}$ in Abbildung 4.9, ist gut zu erkennen, dass bei den nächsten Nachbarn ein Vorzeichenwechsel der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen vorliegt. Die übernächsten Nachbarn sind ausschließlich ferromagnetisch korreliert. Bei den drittnächsten Nachbarn gibt es ein Vorzeichenwechsel im Fall von $N = 18$ und zwei bei $N = 36$. An den Abbildungen ist leicht zu erkennen, dass die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn am stärksten sind und mit zunehmendem Abstand der Trend einer Schwächung abzulesen ist. Die Einführung sowie die Verstärkung der frustrierenden Bindung J_M wirken vorwiegend schwächend auf die Spin-Spin-Korre-

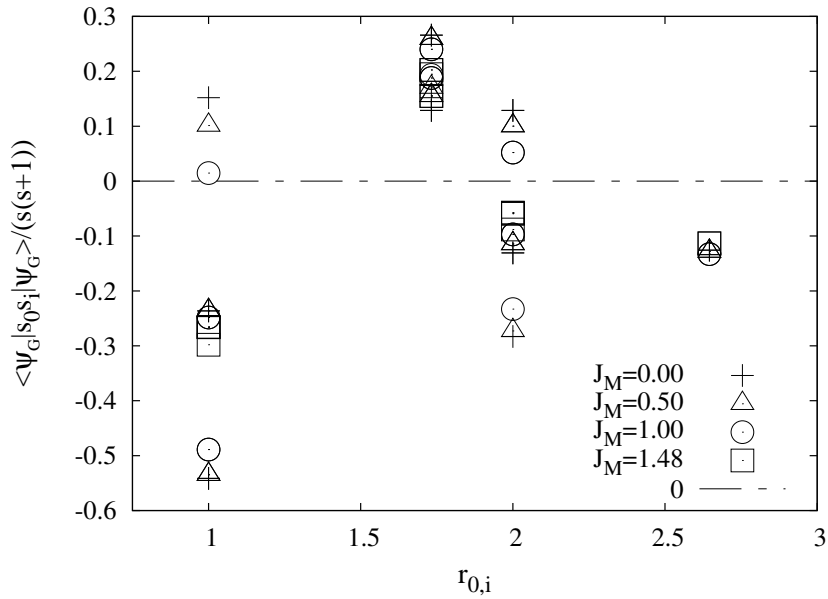
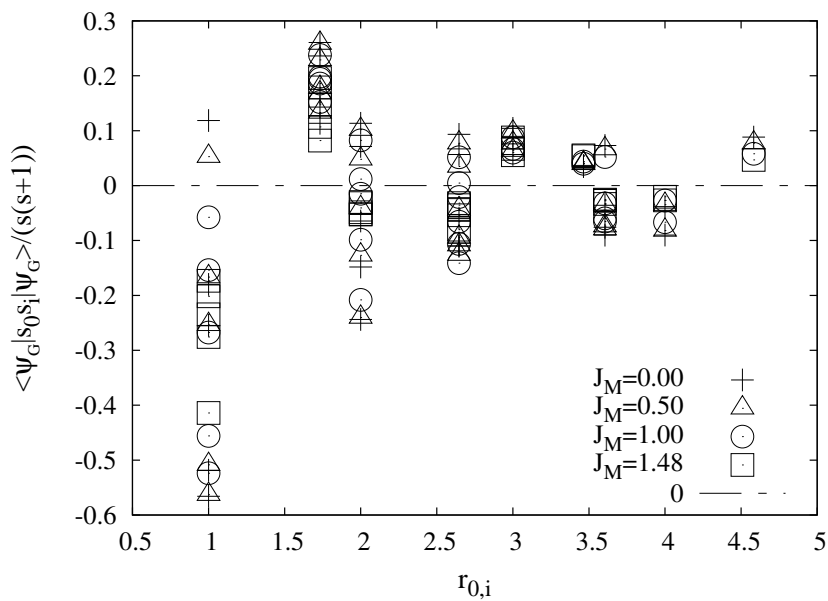
(a) $N = 18$ (b) $N = 36$

Abbildung 4.9.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | s_0 s_i | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ für vier verschiedene Werte des Parameters J_M , der das Bounce-Gitter in das Maple-Leaf-Gitter überführt, in Abhängigkeit vom Abstand zum Spin Null $r_{0,i}$. Zur Orientierung ist die Nulllinie dargestellt.

Tabelle 4.2.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | s_{0i} | \psi_G \rangle$ des Gitters mit $N = 18$ für vier verschiedene Werte des Parameters $J_M = 0, 0.5, 1, 1.48$. In der letzten Spalte werden noch die Quadrate der Abstände $\mathbf{r}_{0,i}^2$ zwischen dem Spin 0 und Spin i angegeben.

| Platz i | Werte des Parameters J_M | | | | Abstand $\mathbf{r}_{0,i}^2$ |
|--------------|----------------------------|-----------------|-----------------|------------------|---------------------------------|
| | 0 | 0.5 | 1 | 1.48 | |
| 1 | -0.177299 | -0.177219 | -0.186299 | -0.199533 | 1 |
| 2 | -0.406100 | -0.401135 | -0.366673 | -0.199223 | 1 |
| 3 | -0.177299 | -0.177219 | -0.186299 | -0.199533 | 1 |
| 4 | 0.096655 | 0.075030 | 0.039003 | -0.043168 | 4 |
| 5 | 0.113969 | 0.127766 | 0.145098 | 0.146113 | 3 |
| 6 | -0.094240 | -0.096222 | -0.099672 | -0.085024 | 7 |
| 7 | -0.098028 | -0.085938 | -0.072868 | -0.044461 | 4 |
| 8 | 0.096655 | 0.075030 | 0.039003 | -0.043168 | 4 |
| 9 | 0.199461 | 0.194508 | 0.180027 | 0.116308 | 3 |
| 10 | 0.096655 | 0.116468 | 0.140873 | 0.151805 | 3 |
| 11 | -0.212146 | -0.204692 | -0.174804 | -0.066016 | 4 |
| 12 | -0.094240 | -0.096222 | -0.099672 | -0.085024 | 7 |
| 13 | 0.199461 | 0.194508 | 0.180027 | 0.116308 | 3 |
| 14 | 0.096655 | 0.116468 | 0.140873 | 0.151805 | 3 |
| 15 | -0.098028 | -0.085938 | -0.072868 | -0.044461 | 4 |
| 16 | -0.406100 | -0.401135 | -0.366673 | -0.199223 | 1 |
| 17 | 0.113969 | 0.075944 | 0.010923 | -0.223504 | 1 |

lationsfunktionen. Dies ist daran zu erkennen, dass die Kreuze, Dreiecke, Kreise und Quadrate in Abbildung 4.9 oft, was ihren absoluten Wert betrifft, in der soeben genannten Reihenfolge geordnet sind. Schwächungen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen mit zunehmendem Abstand und mit der Einführung und der Verstärkung der Bindung J_M sind nicht die Regel bei allen Spinpaaren. Zu Abbildung 4.9 ist weiterhin zu bemerken, dass bei $J_M = 1.48$ (dargestellt durch Quadrate) die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten, übernächsten, drittnächsten, u.s.w. Nachbarn entweder antiferromagnetisch oder ferromagnetisch geordnet sind. Für kleinere Werte von J_M können die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gleicher Nachbarn unterschiedliche Vorzeichen besitzen.

Eine Darstellung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der beiden Gitter in Abhängigkeit des Parameters J_M ist in Abbildung 4.10 zu sehen. Das Gitter mit $N = 18$ besitzt die in (a) gezeigten zehn Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Für $N = 36$ sind die 33 unterschiedlichen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in (b) abgebildet. Auf die Darstellung der Datenpunkte wurde bei $N = 18$ verzichtet, da sie bedeutend dichter als bei $N = 36$ liegen. Um das Verhalten aller Spin-Spin-Korrelationsfunktionen im Fall von $N = 36$ übersichtlich zu repräsentieren, sind den einzelnen Kurven nicht die

Tabelle 4.3.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_i | \psi_G \rangle$ des Gitters mit $N = 36$ für die vier verschiedene Werte des Parameters $J_M = 0, 0.5, 1, 1.48$. In der letzten Spalte werden noch die Quadrate der Abstände $\mathbf{r}_{0,i}^2$ zwischen dem Spin 0 und Spin i angegeben.

| Platz i | Werte des Parameters J_M | | | | Abstand $\mathbf{r}_{0,i}^2$ |
|--------------|----------------------------|-----------------|------------------|------------------|---------------------------------|
| | 0 | 0.5 | 1 | 1.48 | |
| 1 | -0.134976 | -0.124917 | -0.115386 | -0.175830 | 1 |
| 2 | -0.388893 | -0.381513 | -0.341847 | -0.130125 | 1 |
| 3 | -0.191013 | -0.190263 | -0.200760 | -0.206745 | 1 |
| 4 | 0.085155 | 0.076362 | 0.061830 | -0.023982 | 4 |
| 5 | 0.126543 | 0.133728 | 0.139422 | 0.110391 | 3 |
| 6 | -0.044478 | -0.032061 | -0.015540 | -0.023910 | 7 |
| 7 | -0.026847 | -0.025779 | -0.024273 | -0.025035 | 13 |
| 8 | 0.053544 | 0.035955 | 0.008853 | -0.036438 | 4 |
| 9 | 0.067272 | 0.057789 | 0.045120 | 0.050250 | 9 |
| 10 | 0.085155 | 0.099939 | 0.114180 | 0.134106 | 3 |
| 11 | -0.082704 | -0.070779 | -0.049287 | -0.032055 | 7 |
| 12 | -0.044478 | -0.032061 | -0.015540 | -0.023910 | 7 |
| 13 | 0.177120 | 0.171678 | 0.148797 | 0.061488 | 3 |
| 14 | 0.027612 | 0.030675 | 0.032730 | 0.040146 | 12 |
| 15 | -0.078591 | -0.081282 | -0.079713 | -0.026784 | 7 |
| 16 | -0.067506 | -0.061272 | -0.050031 | -0.015324 | 16 |
| 17 | 0.054726 | 0.049794 | 0.039015 | -0.020760 | 13 |
| 18 | -0.082254 | -0.094365 | -0.105876 | -0.060192 | 7 |
| 19 | 0.078267 | 0.072729 | 0.066000 | 0.065820 | 9 |
| 20 | 0.107250 | 0.126327 | 0.145830 | 0.146934 | 3 |
| 21 | -0.048432 | -0.030432 | -0.011094 | -0.039033 | 4 |
| 22 | -0.424449 | -0.422337 | -0.392970 | -0.151149 | 1 |
| 23 | 0.088893 | 0.039450 | -0.043299 | -0.310545 | 1 |
| 24 | 0.066195 | 0.057813 | 0.043482 | 0.035025 | 21 |
| 25 | -0.056958 | -0.055377 | -0.049053 | -0.019989 | 13 |
| 26 | -0.067671 | -0.059301 | -0.044811 | -0.019152 | 13 |
| 27 | -0.028776 | -0.026052 | -0.020382 | -0.020193 | 16 |
| 28 | 0.042420 | 0.026037 | 0.003378 | -0.040494 | 7 |
| 29 | 0.025989 | 0.029679 | 0.029823 | 0.041256 | 12 |
| 30 | -0.082254 | -0.094365 | -0.105876 | -0.060192 | 7 |
| 31 | -0.111123 | -0.095247 | -0.073962 | -0.039465 | 4 |
| 32 | 0.070083 | 0.057912 | 0.038730 | -0.033318 | 7 |
| 33 | 0.195558 | 0.194031 | 0.178506 | 0.080169 | 3 |
| 34 | 0.042420 | 0.047745 | 0.050079 | 0.041463 | 9 |
| 35 | -0.182796 | -0.180234 | -0.156078 | -0.022428 | 4 |

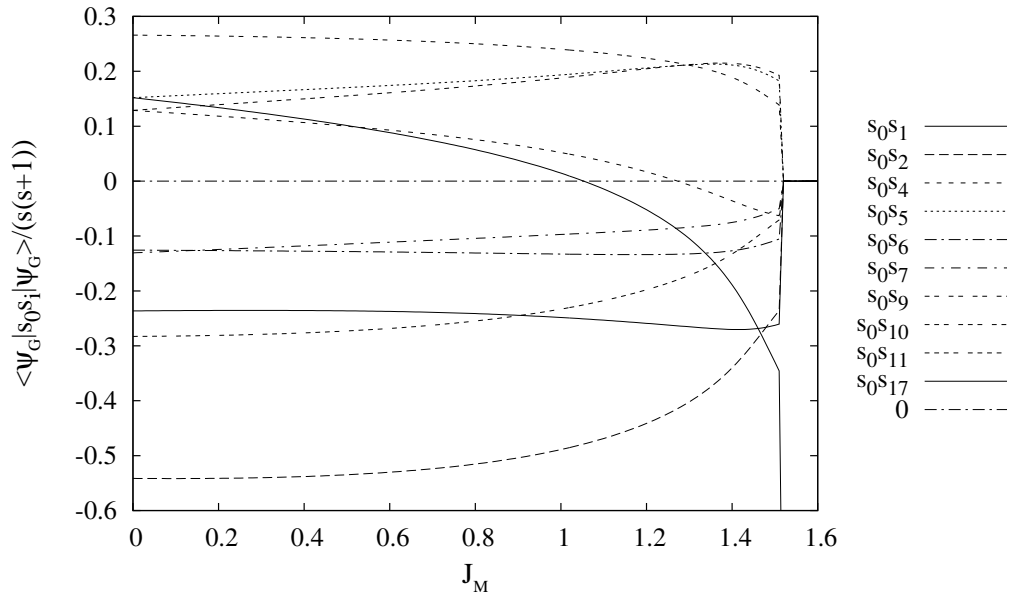
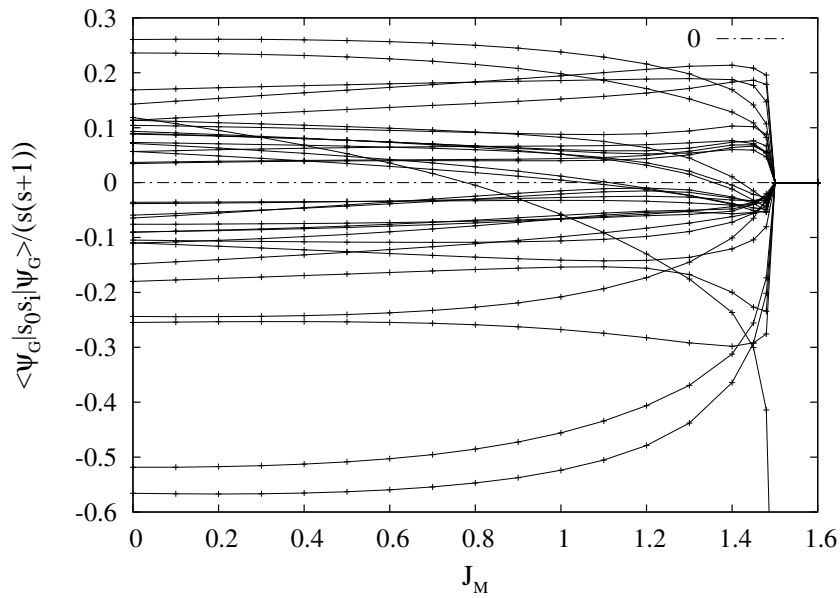
(a) $N = 18$ (b) $N = 36$

Abbildung 4.10.: Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_i | \psi_G \rangle / (s(s+1))$ des Maple-Leaf-Gitters in (a) mit $N = 18$ und in (b) mit $N = 36$ in Abhängigkeit des Parameters J_M , der das Bounce-Gitter ($J_M = 0$) in das Maple-Leaf-Gitter überführt. Zur Orientierung ist die Nulllinie dargestellt.

konkreten Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in einer Legende zugeordnet. Leicht zu identifizieren sind in Abbildung 4.10 (a) und (b) die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen der nächsten Nachbarn, welche über J_M aneinander gebunden sind. Sie sind im Bounce-Gitter ferromagnetisch korreliert. Mit größer werdendem J_M nehmen sie zunächst ab, bis sie antiferromagnetisch sind. Daraufhin wird die antiferromagnetischen Spin-Spin-Korrelationsfunktion der nächsten Nachbarn durch die Zunahme von J_M verstärkt. Bei dem gleichen Wert von J_M , an dem sich auch die übrigen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen sprunghaft ändern, nehmen sie den Wert minus eins an. Die sprunghafte Änderung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen deutet auf einen Quantenphasenübergang erster Ordnung hin. Des Weiteren ist aus den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen ersichtlich, dass in der Phase bei großen Werten von J_M nur noch Singulets existieren. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen aller durch J aneinander gekoppelten Spins verschwinden nach dem Übergang.

4.3.3. Untergittermagnetisierung bei $T = 0$

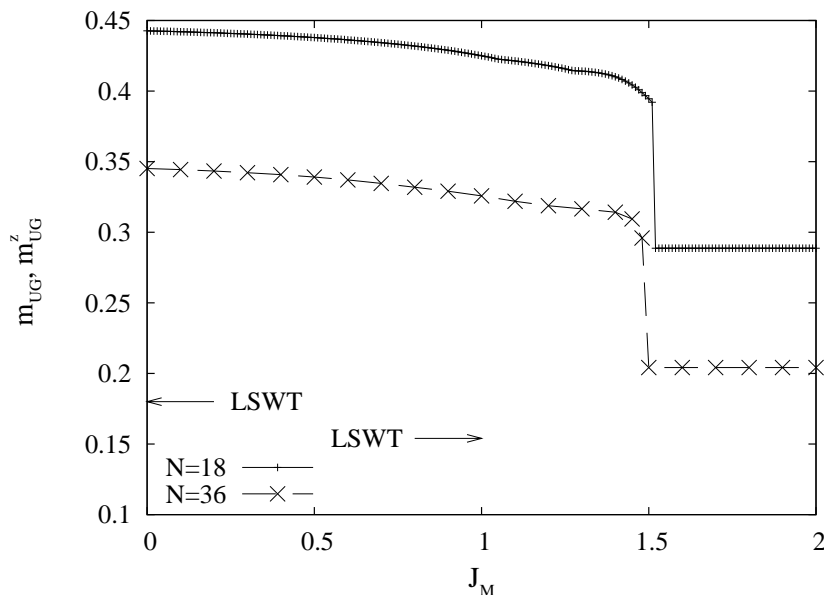


Abbildung 4.11.: Für das Gitter mit $N = 18$ und $N = 36$ Spins wird die Untergittermagnetisierung m_{UG} in Abhängigkeit vom Parameter J_M , der das Bounce-Gitter ($J_M = 0$) in das Maple-Leaf-Gitter ($J_M = 1$) überführt, dargestellt. LSWT beschriftete Pfeile gebend die Werte der Untergittermagnetisierungen m_{UG}^z der Linearen Spinwellentheorie für das Bounce- und das Maple-Leaf-Gitter an.

Als Ordnungsparameter wird die Untergittermagnetisierung:

$$m_{UG} = \left(\frac{1}{N^2} \sum_{i,j} |\langle \psi_G | \mathbf{s}_0 \mathbf{s}_i | \psi_G \rangle| \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.37)$$

welche sich aus der mit dem Faktor $1/N^2$ versehenen Summe der absoluten Werte der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen zusammensetzt, untersucht. Sie ist gemeinsam mit der Untergittermagnetisierung m_{UG}^z der linearen Spinwellentheorie, die man für das Bounce- und das Maple-Leaf-Gitters erhält, in Abbildung 4.11 zu sehen.

Mit zunehmendem J_{M} nimmt die Untergittermagnetisierung bis zur Dimer-Phase bei $J_{\text{M}} \approx 1.5$ ab. In beiden Gittern schwankt die Rate der Abnahme geringfügig zwischen $J_{\text{M}} \approx 1$ und $J_{\text{M}} \approx 1.5$. Der Sprung zur Magnetisierung in der Dimer-Phase kann als Hinweis auf einen Quantenphasenübergang erster Ordnung gesehen werden. Die Untergittermagnetisierung zeigt, dass die mit J_{M} eingebrachte Frustration die Magnetisierung verringert. Wirken zusätzlich ins System gebrachte Bindungen nicht frustrierend, so ist der Einfluss der Quantenfluktuationen geringer und die Magnetisierung nimmt zu. Frustration verstärkt den Einfluss der Quantenfluktuationen und führt trotz einer Erhöhung der Koordinationszahl zu einer Verringerung der magnetischen Ordnung. In die Berechnungen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und somit auch der Untergittermagnetisierung des Gitters mit $N = 36$ ist die Annahme einbezogen wurden, dass der Grundzustand, wie auch beim Gitter mit $N = 18$, nicht entartet ist, so dass $\langle \psi_{\text{G}} | \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j | \psi_{\text{G}} \rangle = 3 \langle \psi_{\text{G}} | s_i^z s_j^z | \psi_{\text{G}} \rangle$ gilt. Die Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie in Abbildung 4.11 deuten zumindest für $0 \leq J_{\text{M}} \leq 1$ auf ein qualitativ ähnliches Verhalten der Untergittermagnetisierungen m_{UG} und m_{UG}^z hin.

EIN DREIDIMENSIONALES SYSTEM: DAS KUBISCH RAUMZENTRIERTE GITTER

Die besonderen Eigenschaften des J_1 - J_2 -Modells auf dem Quadratgitter, bei dem das Zusammenspiel aus Quantenfluktuationen und Frustration eine magnetisch ungeordnete Phase erzeugt, haben die Untersuchung dieses Modells auf dem kubisch raumzentrierten Gitter inspiriert. Der Einfluss der Dimensionalität bei $T = 0$ kann durch den Vergleich der Resultate für das zweidimensionale Quadratgitter und das dreidimensionale kubisch raumzentrierte Gitter studiert werden. Aus (1.1) entsteht durch Vernachlässigung aller Bindungen bis auf die der nächsten und übernächsten Nachbarn und das Weglassen des Feldtermes, welcher mit der zweiten Summe von (1.1) zu identifizieren ist, das bekannte J_1 - J_2 -Modell

$$H = J_1 \sum_{i < j}^N \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + J_2 \sum_{m < n}^N \mathbf{s}_m \mathbf{s}_n . \quad (5.1)$$

Hier ist $J_1 = J = 1$ das Austauschintegral der nächsten Nachbarn und $J_2 \geq 0$ das frustrierende Austauschintegral der übernächsten Nachbarn. Wegen der äußerst interessanten Eigenschaften in zwei Dimensionen ist das J_1 - J_2 -Modell von großem Interesse [52, 130–139]. Es ist Gegenstand der aktuellen Forschung, da es im Grundzustand z.B. auf dem Quadratgitter in der Phase oder in den Phasen zwischen der Néel-geordneten Phase und der kollinearen Phase noch ungeklärte Eigenschaften besitzt. Die Néel-geordnete Phase wird auf dem Quadratgitter bei $T = 0$ für kleine Werte von J_2 eingenommen und die kollineare Phase für große Werte von J_2 . Zur Illustration sind beide Phasen in Abbildung 5.1 dargestellt. In Abbildung 5.1 (b) symbolisieren die Kreise die unendlich vielen Einstellungsmöglichkeiten im klassischen J_1 - J_2 -Modell, wobei der Winkel zwischen allen nächsten Nachbarn mit Kreisen π ist. Der Winkel zwischen nächsten Nachbarn mit und ohne Kreis ist hingegen im klassischen Modell beliebig. Diese Entartung wird durch Quantenfluktuationen aufgehoben und es erfolgt eine kollineare Ausrichtung der Spins.

Das kubisch raumzentrierte Gitter ist ein dreidimensionales Gitter, welches sich zum Vergleich mit dem Quadratgitter für das Studium des Einflusses der Dimension eignet. Im Grenzfall kleiner J_2 -Bindungen ist das kubisch raumzentrierte Gitter bipartit wie das Quadratgitter und im Grenzfall von großen J_2 -Bindungen zerfällt es ebenfalls analog zum Quadratgitter in zwei bipartite Untergitter. Als Parameter der Frustration

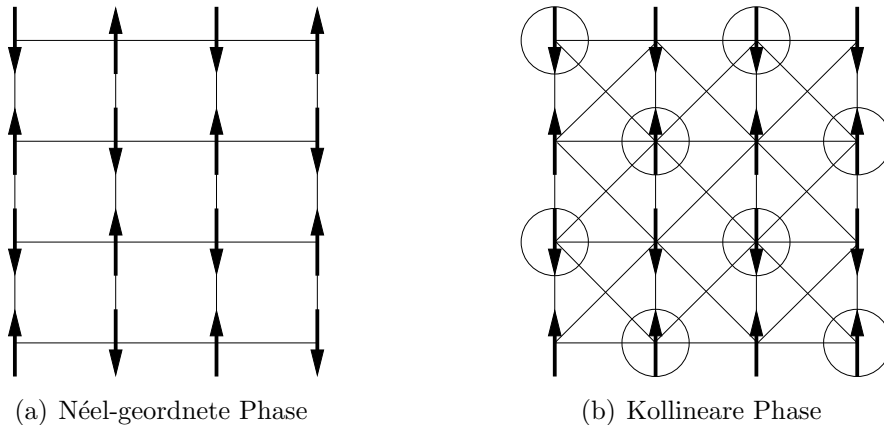


Abbildung 5.1.: Der Néel-geordnete Grundzustand des Quadratgitters für $J_2 = 0$ in (a) und der kollineare Zustand bei $J_2 > J_1$ in (b). Die Kreise in (b) symbolisieren die unendlich vielen Einstellungsmöglichkeiten im klassischen J_1 - J_2 -Modell.

kann

$$p = \frac{J_2 z_2}{J_1 z_1} \quad (5.2)$$

dienen, wobei z_1 die Anzahl der nächsten und z_2 die Anzahl der übernächsten Nachbarn ist. Mit diesem Parameter liegt der Übergang des klassischen J_1 - J_2 -Modells beim kubisch raumzentrierten Gitter sowie beim Quadratgitter bei $p = \frac{1}{2}$. Wie in Kapitel 4 wird auch in diesem Kapitel nur der extreme Quantenfall ($s = \frac{1}{2}$) untersucht.

5.1. EXAKTE DIAGONALISIERUNG

Betts und Koautoren [47, 140–142] haben gezeigt, dass mit drei Vektoren in „upper triangular lattice form“ (utlf) kubisch raumzentrierte Gitter systematisch erzeugt werden können. Es gibt zehn kubisch raumzentrierte Gitter mit $N \leq 36$, welche die folgenden drei Bedingungen erfüllen:

- (i) Jeder Platz besitzt acht nächste und sechs übernächste Nachbarn, d.h. die volle Anzahl an nächsten und übernächsten Nachbarn.
- (ii) Die endlichen Gitter sind bi-bipartit, um durch Randbedingungen erzeugte Frustrationen zu verhindern. Mit bi-bipartit können Gitter bezeichnet werden, welche in zwei bipartite Untergitter zerfallen.
- (iii) Die Gitter sind topologisch verschieden, das bedeutet, dass der Hamilton-Operator (5.1) unterschiedliche physikalische Eigenschaften aufweist.

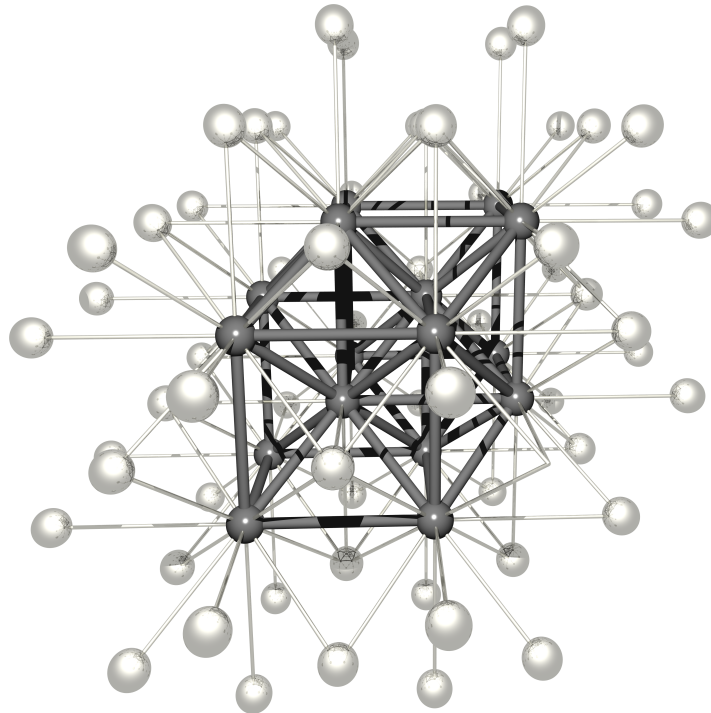


Abbildung 5.2.: Das kubisch raumzentrierte Gitter mit 16 Spins und periodischen Randbedingungen. Die Randvektoren dieses Gitters sind $c_2(2, 0, 0)$, $c_2(0, 2, 0)$ und $c_2(0, 0, 2)$. Hier steht c_2 für den Abstand zwischen übernächsten Nachbarn. Die hellen Kugeln und dünnen hellen Zylinder symbolisieren die periodischen Randbedingungen.

Die Gitter 24C, 28D, 32D, 32F, 32H, 32J, 32K, 36A, 36B und 36C aus [141] erfüllen diese drei Bedingungen.

Zur Illustrierung des kubisch raumzentrierten Gitters ist in Abbildung 5.2 das Gitter 16A (Notation aus [141]) mit periodischen Randbedingungen gezeigt. Obwohl es nicht die drei Bedingungen erfüllt, wurde es ausgewählt, da es wegen seiner geringen Anzahl von Spins ($N = 16$) am übersichtlichsten ist. Mit den hellen Kugeln und dünnen hellen Zylindern werden die periodischen Randbedingungen dargestellt. Die dickeren und dunkleren Zylinder symbolisieren die Bindungen innerhalb des Gitters, die keine Randbedingungen sind. Diese Bindungen bilden zwei Würfel an deren Ecken die sechzehn Plätze des Gitters liegen, wobei sich eine Ecke der Würfel im Zentrum des anderen Würfels befindet. Wie bei den zweidimensionalen Gittern in Abbildung 3.1 und Abbildung 4.7 sind einige Randbedingungen mehrfach dargestellt.

5.1.1. Grundzustandsenergie

Im thermodynamischen Grenzfall signalisiert ein Knick in der Grundzustandsenergie und dementsprechend ein Sprung in der ersten Ableitung dE_G/dp einen Phasenübergang erster Ordnung. Bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung verändert sich die

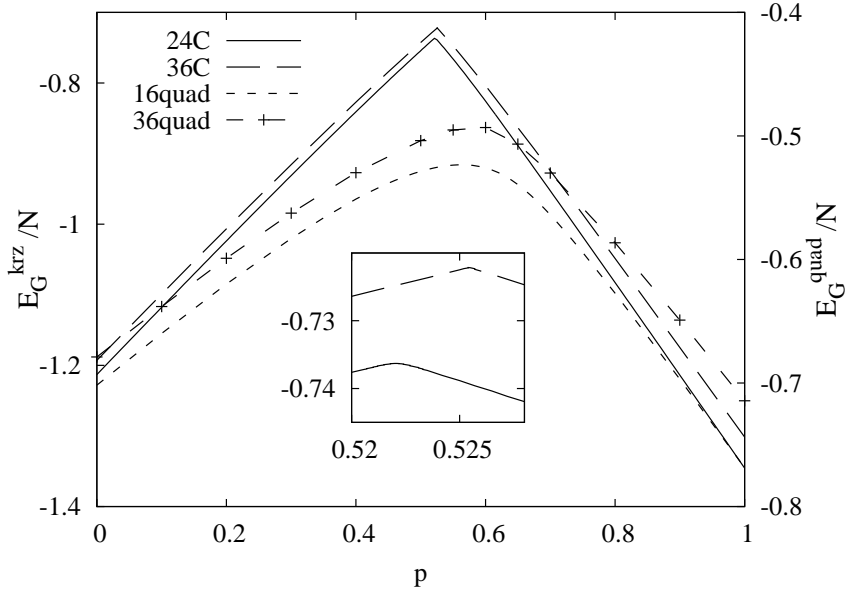


Abbildung 5.3.: Die Grundzustandsenergie pro Platz der kubisch raumzentrierten Gitter 24C und 36C (E_G^{krz}/N) sowie der Quadratgitter (E_G^{quad}/N) mit $N = 16, 36$ (16quad, 36quad) in Abhängigkeit vom Frustrationsparameter p .

Grundzustandsenergie kontinuierlich.

In Abbildung 5.3 wird die Grundzustandsenergie pro Platz für zwei kubisch raumzentrierte Gitter gezeigt. Es ist die Grundzustandsenergie des kleinsten kubisch raumzentrierten Gitters 24C und eines kubisch raumzentrierten Gitters mit $N = 36$ abgebildet. In dieser Darstellung wie auch in einigen folgenden sind im Falle von $N = 32, 36$ repräsentativ die Eigenschaften von Gittern mit hoher Symmetrie zu sehen. Zum Vergleich sind auch die Ergebnisse für das Quadratgitter mit $N = 4 \times 4 = 16$ und $N = 6 \times 6 = 36$ angegeben. Schulz und Koautoren untersuchten das $J_1 - J_2$ -Modell für diese und zwei weitere Quadratgitter mit $N = 20, 32$ in [143]. Aufgrund des geringeren Rechenaufwands werden in den Abschnitten Phasenbeziehungen im Grundzustand und Singulett-Triplett-Anregungslücke Ergebnisse für das Gitter mit $N = 32$ (aus [143]) präsentiert.

Es ist anzunehmen, dass ein quadratisches Gitter mit $N = 16$ Spins mit einem kubisch raumzentrierten Gitter mit $N = 36$ vergleichbar ist. Zu diesem Schluss kann man gelangen, wenn man die charakteristischen Längen von zweidimensionalen Gittern $L_{2d} \propto N^{\frac{1}{2}}$ und dreidimensionalen Gittern $L_{2d} \propto N^{\frac{1}{3}}$ betrachtet. Damit die Grundzustandsenergie des Quadratgitters mit $N = 16$ in der Nähe der Grundzustandsenergie des kubisch raumzentrierten Gitters mit $N = 36$ liegt, sind die Energien der Quadratgitter mit dem Faktor $7/4$ skaliert. Das Maximum von $E_G(p)$ wird am Punkt der größten Frustration eingenommen. In der Vergrößerung ist das Maximum der Gitter 24C und 36C dargestellt. Man kann erkennen, dass mit zunehmender Systemgröße der Knick deutlicher ausgebildet ist. Das kann ein Hinweis darauf sein, dass der Knick

auch im thermodynamischen Grenzwert existiert.

Die Grundzustandsenergien der kubisch raumzentrierten Gittern ähneln sehr stark den Energien des klassischen $J_1 - J_2$ -Modells. Die Energie des klassischen Modells ist durch die zwei Geraden $E(p)/N = (p - 1)$ für $p \leq 0.5$ und $E(p)/N = -p$ für $p \geq 0.5$ gegeben.

Die Grundzustandswellenfunktion $|\psi_G\rangle$ der kubisch raumzentrierten Gitter ist nach numerischen Erfahrungen für alle p ein Singulett. Analog zum Quadratgitter [131] besitzt die Grundzustandswellenfunktion $|\psi_G\rangle$ von kubisch raumzentrierten Gittern mit $N \bmod 8 = 0$ die Translationssymmetrie $\mathbf{k}_G = (0, 0, 0)$. Die Translationssymmetrie von Gittern mit $N \bmod 4 = 0$ und $N \bmod 8 \neq 0$ ist für kleine und große Werte des Frustrationsparameters unterschiedlich. Man findet die Änderung der Grundzustandssymmetrie von $\mathbf{k}_G = (0, 0, 0)$ nach $\mathbf{k}_G = (\pi, \pi, \pi)$ leicht rechts vom Maximum der Grundzustandsenergie. In [144] sind die Grundzustandsenergien der zehn kubisch raumzentrierten Gitter für $J_2 = 0, 0.7, 1.3333$ aufgelistet. Bei $J_2 = 0$ ($p = 0$) sind die Systeme unfrustriert, $J_2 = 0.7$ ($p = 0.525$) ist ein Wert in der Region der stärksten Frustration und bei $J_2 = 1.3333$ ($p \approx 1$) sind die in zwei Untergitter zerfallenen Systeme lediglich schwach frustriert.

5.1.2. Phasenbeziehungen im Grundzustand

Die Phasenbeziehungen der Ising-Basiszustände $|n\rangle$ des Grundzustandes von bipartiten Heisenberg-Antiferromagneten, die bei $p = 0$ aus (5.1) entstehen können, ist durch die Marshall-Peierls-Vorzeichenregel [145] gegeben. Die Vorzeichenregel lässt sich wie

$$|\psi_G\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{mit } c_n > 0 \quad (5.3)$$

formulieren. Die Ising-Basiszustände sind

$$|n\rangle \equiv (-1)^{N/2 - M(X)} |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle \otimes \dots \otimes |m_N\rangle, \quad (5.4)$$

wobei $|m_i\rangle$, $i = 1, \dots, N$, die Eigenzustände des Spinoperators s_i^z (d.h. $m_i = \pm \frac{1}{2}$) sind und $M(X) = \sum_{i \in X} m_i$ gilt. Mit X wird bei kleinen Werten von p eines der beiden Untergitter A oder B bezeichnet. Bei großen Werten von p besteht eine antiferromagnetische Ordnung innerhalb der Untergitter A und B . Das Untergitter A zerfällt dementsprechend in A_1 sowie A_2 und das Untergitter B in B_1 sowie B_2 . Da die Untergitter A und B bei großen p -Werten nicht mehr existieren, gilt die Vorzeichenregel mit $X = A_1 \cup B_1$. Beim Quadratgitter wird die Vorzeichenregel bei kleiner Frustration nicht verletzt [132, 133]. Im Gebiet starker Frustration findet man hingegen eine deutliche Verletzung der Marshall-Peierls-Vorzeichenregel, die einen Zusammenbruch der bipartiten Struktur anzeigt.

In Abbildung 5.4 ist das Gewicht $g(X) = \sum'_n (c_n)^2$ der Ising-Basiszustände $|n\rangle$, die die Marshall-Peierls-Vorzeichenregel erfüllen, für die kubisch raumzentrierten Gitter

24C und 32D und die quadratischen Gitter 16quad und 32quad in Abhängigkeit von p gezeigt. Die Summe \sum'_n beschränkt sich auf die Untermenge von Zuständen für die gilt $c_n > 0$. Die kubisch raumzentrierten Gitter verletzen die Vorzeichenregel (5.3)

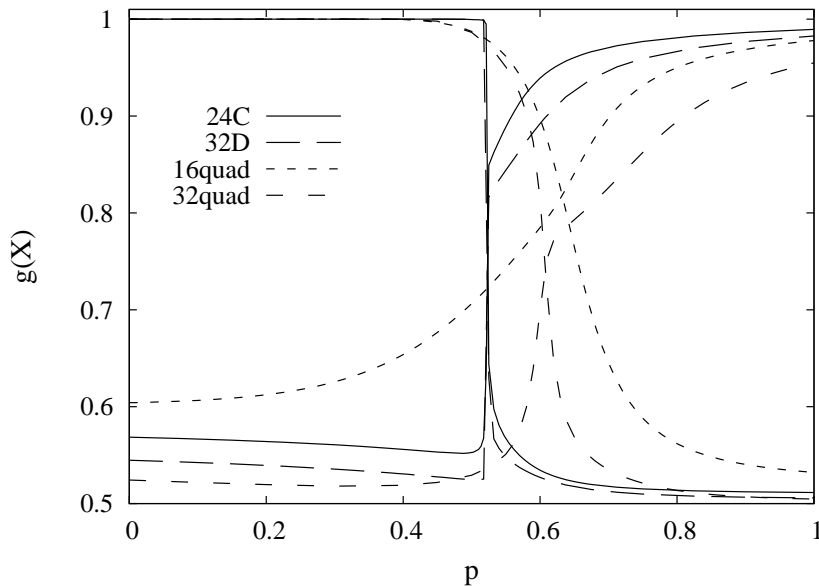


Abbildung 5.4.: Das Gewicht $g(A)$ und $g(A_1 \cup B_1)$ der Basiszustände, die die Marshall-Peierls Vorzeichenregel erfüllen, von den kubisch raumzentrierten Gittern 24C und 32D sowie den quadratischen Gitter 16quad und 32quad in Abhängigkeit vom Frustrationsparameter p . $g(A)$ ist eins für $p = 0$ und $g(A_1 \cup B_1)$ geht für $p \gg 0$ gegen eins.

sprunghaft an dem Punkt wo die Grundzustandsenergie ihr Maximum hat. Es gibt demnach drastische Veränderungen des Grundzustandes bei $p \approx 0.52$, welche durch den Zusammenbruch der Néelordnung hervorgerufen werden. Im Unterschied dazu beginnt die Verletzung der Vorzeichenregel beim Quadratgitter sanft bei $p \approx 0.4$. Bei diesem Wert des Frustrationsparameters ist auch der Phasenübergang zweiter Ordnung zur Spinflüssigkeitsphase anzusiedeln. Die Verletzung der veränderten Vorzeichenregel innerhalb der anfänglichen Untergitter, die aus $g(A_1 \cup B_2)$ abgelesen werden kann, verändert sich beim kubisch raumzentrierten Gitter wie $g(A)$ ebenfalls sprunghaft und eher sanft beim Quadratgitter. Die veränderte Vorzeichenregel wird aufgrund der Kopplung der Untergitter $A (\rightarrow A_1, A_2)$ und $B (\rightarrow B_1, B_2)$ in der kollinearen Phase bei $p \approx 1$ nicht erfüllt. Eine vollständige Erfüllung der veränderten Vorzeichenregel ist erst im Grenzwert $p \rightarrow \infty$ zu erwarten.

5.1.3. Untergittermagnetisierung bei $T = 0$

Ein wichtiger Parameter zur Erforschung der Néelordnung ist die Untergittermagnetisierung

$$m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}) = \langle \psi_G | \frac{1}{N} \sum_{i \leq j}^N \exp(i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)) s_i^z s_j^z | \psi_G \rangle . \quad (5.5)$$

Im Fall kleiner p ist $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{Néel}} = (\pi, \pi, \pi)$ beim kubisch raumzentrierten Gitter und $\mathbf{Q}_{\text{Néel}} = (\pi, \pi)$ beim Quadratgitter. Für große p sind die magnetischen Wellenvektoren $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{koll } 1,2} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2, \pm\pi/2)$ für das kubisch raumzentrierte Gitter und $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{koll } 1} = (\pi, 0)$ sowie $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{koll } 2} = (0, \pi)$ für das Quadratgitter zu verwenden. Dieser Parameter beschreibt mit $\mathbf{Q}_{\text{Néel}}$ die antiferromagnetische Ordnung zwischen A und B sowie mit $\mathbf{Q}_{\text{koll } 1,2}$ die antiferromagnetische Ordnung zwischen A_1 und A_2 innerhalb des Untergitters A . Die Abkürzung koll steht für kollinear. Die Untergittermagnetisierungen $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{Néel}})$ und $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{koll } 1,2})$ sind in Abbildung 5.5 (a) für die Gitter 24C, 36C, 16quad und 36quad für $p \in [0, 1]$ dargestellt. Außerdem ist in Abbildung 5.5 (a) eine vertikale Linie bei $p = 0.5$ zu sehen, die den klassischen Phasenübergang erster Ordnung markiert. In (b) sind $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{Néel}})$ und $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{koll } 1,2})$ für die vier kubisch raumzentrierten Gitter 24C, 28D, 32J, 36C in der Region der stärksten Frustration $p \in [0.519, 0.528]$ zu sehen. Der Faktor $\exp(i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))$ erzeugt eine Eins bei Spinpaaren die dem gleichen Untergitter angehören und eine minus Eins bei Spinpaaren verschiedener Untergitter. Sind die Zustände nicht entartet, so gilt $3\langle \psi_G | s_i^z s_j^z | \psi_G \rangle = \langle \psi_G | \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j | \psi_G \rangle$.

Beim kubisch raumzentrierten Gitter wird wie auch beim Quadratgitter bei großen Werten eine kollineare Ordnung realisiert. Die klassisch entkoppelten Untergitter A und B sind in dieser kollinearen Phase wieder gekoppelt. Somit heben die Quantenfluktuationen die unendliche Entartung des klassischen Zustands auf und erzeugen einen eindimensionalen Zustand, bei dem die Spins entweder ferromagnetisch oder antiferromagnetisch korreliert sind. Im Abschnitt 5.2.2 „Lineare Spinwellentheorie für große Werte des Frustrationsparameters“ wird gezeigt, dass die Quantenfluktuationen die unendliche Entartung des klassischen Modells bei großen p aufheben und einen kollinearen Zustand erzeugen.

Die Untergittermagnetisierungen des kubisch raumzentrierten Gitters verhalten sich bei starker Frustration deutlich anders als die der quadratischen Gitter. Sie ändern sich verglichen mit dem Quadratgitter sprunghaft, was auf einen Quantenphasenübergang erster Ordnung schließen lässt. Auch der detaillierte Blick auf den Punkt der stärksten Änderung der Untergittermagnetisierungen in Abbildung 5.5 (b) weist darauf hin, dass der Sprung im thermodynamischen Grenzfall existiert.

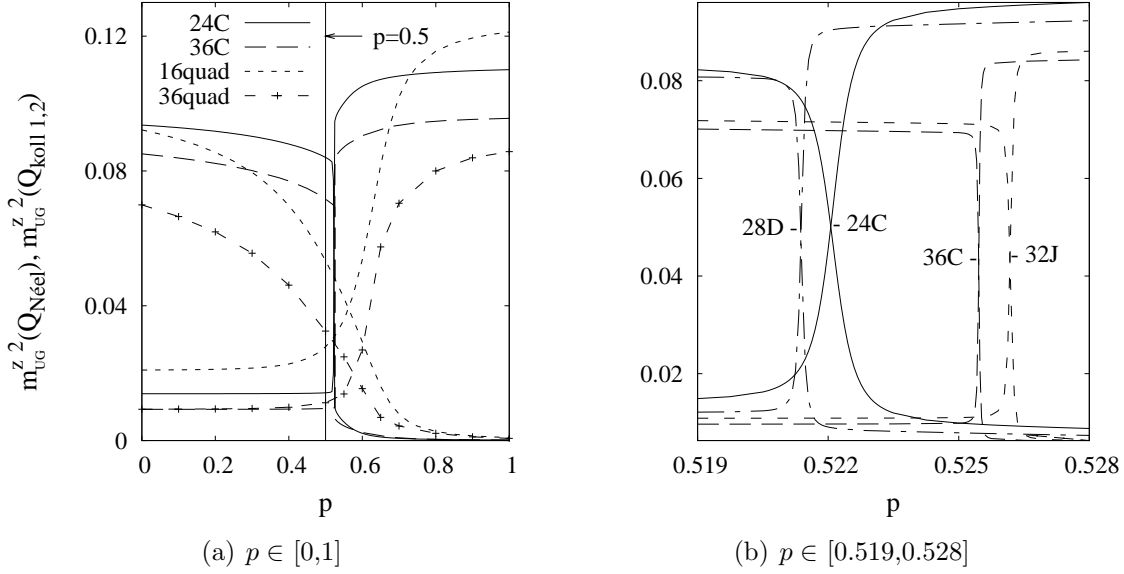


Abbildung 5.5.: Die Untergittermagnetisierungen $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{Néel}})$ und $m_{\text{UG}}^z(\mathbf{Q}_{\text{koll } 1,2})$ in (a) für die kubisch raumzentrierten Gitter 24C und 36C sowie die quadratischen Gitter 16quad und 36quad im Bereich des Frustrationsparameters $p = 0, \dots, 1$ und in (b) für die kubisch raumzentrierten Gitter 24C, 28D, 32J, 36C in der am stärksten frustrierten Region $p = 0.519, \dots, 0.528$. Die vertikale Linie in (a) markiert den klassischen Phasenübergang bei $p = 0.5$.

5.1.4. Singulett-Triplett-Anregungslücke

Hinweise auf eine ungeordnete Phase, z.B. eine Spinflüssigkeit, kann die Singulett-Triplett-Anregungslücke Δ_{ST} geben. In Systemen, die Néelordnung aufweisen, gibt es Goldstone-Moden und keine Singulett-Triplett-Anregungslücke im thermodynamischen Grenzfall. Die Singulett-Triplett-Anregungslücke der Gitter 24C, 36C, 16quad, 32quad wird in Abbildung 5.6 wiedergegeben. Wie der Grundzustand ändert auch die erste Triplett-Anregung ihre Symmetrie. Für kleine Werte von p besitzt sie die Translationssymmetrie $\mathbf{k}_{\text{T}} = (\pi, \pi, \pi)$ und für große Werte des Frustrationsparameters gilt $\mathbf{k}_{\text{T}} = (\pi/2, \pi/2, \pi/2)$. Für jede Komponente k_j ($j = x, y, z$) des Translationsvektors \mathbf{k}_{T} lässt sich die Eigenwertgleichung (4.36) wie

$$P_i |\psi(k_m)\rangle = \exp(ik_j) |\psi(k_m)\rangle \quad (5.6)$$

schreiben.

Offensichtlich nimmt Δ_{ST} in der Néelphase bei den kubisch raumzentrierten Gittern bis $p = 0.52$ nur sehr gering zu. In der sich anschließenden kollinearen Phase ist eine lineare Zunahme der Lücke mit p zu erwarten, denn J_2 ist für die Anregungen ausschlaggebend. Das Anwachsen der Lücke in der kollinearen Phase kann auch bei den quadratischen Gittern beobachtet werden. Die Singulett-Triplett-Anregungslücke

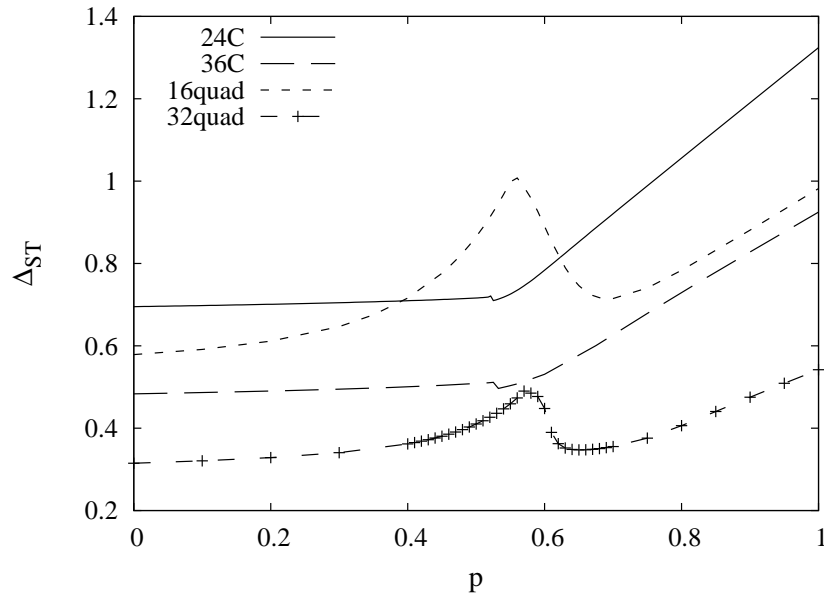


Abbildung 5.6.: Die Singulett-Triplett-Anregungslücke Δ_{ST} der kubisch raumzentrierten Gitter 24C, 36C und der quadratischen Gitter 16quad, 32quad in Abhängigkeit vom Frustrationsparameter p .

wächst bei den quadratischen Gittern schon bei kleineren Werten von p deutlich an und besitzt auch ein bedeutend stärker ausgeprägtes Maximum als die Lücke der kubisch raumzentrierten Gitter. Obwohl Δ_{ST} im Bereich starker Frustration mit zunehmender Systemgröße kleiner wird, ist beim Quadratgitter eine Lücke für $N \rightarrow \infty$ wahrscheinlich. Der Vergleich der Lücke Δ_{ST} der kubisch raumzentrierten Gitter mit den Quadratgittern legt den Schluss nahe, dass im Gegensatz zu den quadratischen Gittern bei den kubisch raumzentrierten Gittern im thermodynamischen Grenzfall keine Singulett-Triplett-Anregungslücke zu erwarten ist. Das ist mit der Aussage konsistent, dass für alle Werte des Frustrationsparameters eine „magnetische Ordnung“ vorhanden ist.

5.2. DAS UNENDLICH AUSGEDEHNT GITTER

5.2.1. Extrapolation

Um Eigenschaften des unendlich ausgedehnten kubisch raumzentrierten Gitters zu erhalten, können Extrapolationen der aus der exakten Diagonalisierung gewonnenen Daten vorgenommen werden. In zwei Dimensionen ist die Extrapolation eine anerkannte Methode zur Berechnung von Eigenschaften des $J_1 - J_2$ -Modells auf dem unendlichen Quadratgitter [131, 143]. Ebenso können Extrapolationen in drei Dimensionen zu genauen Daten unendlicher Gitter führen [140–142]. Die entsprechenden Skalierungsgesetze sind aus der Literatur bekannt [108, 146, 147]. Die Grundzustandsenergie pro

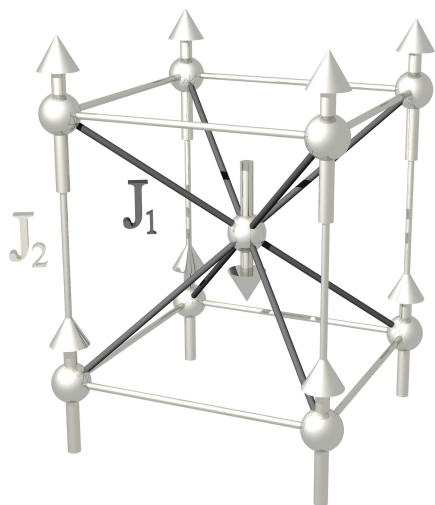


Abbildung 5.7.: Die klassische Einstellung der Spins in der magnetischen Einheitszelle des kubisch raumzentrierten Gitters bei kleinen Werten des Frustrationsparameters p .

Platz ist bei kubisch raumzentrierten Gitter durch

$$E_G/N = \epsilon(\infty) + a_4 L^{-4} + \dots \quad (5.7)$$

und die Untergittermagnetisierung durch

$$m_z^2(L) = m_z^2(\infty) + b_2 L^{-2} + \dots \quad (5.8)$$

gegeben, wobei $L = N^{1/3}$ zu setzen ist. Die zur Extrapolation verwendeten Daten können [144] entnommen werden. Die Ergebnisse der Extrapolationen sind zusammen mit den Ergebnissen der linearen Spinwellentheorie im nächsten Abschnitt abgebildet. Aus diesem Grund erfolgt die Diskussion der Extrapolation am Ende des Abschnittes 5.2.2.

5.2.2. Lineare Spinwellentheorie

Lineare Spinwellentheorie für kleine Werte des Frustrationsparameters

Beim klassischen Analogon von (5.1) besteht bei kleinen Werten von p eine Néé-geordnete Phase, wie man sie auch beim Quadratgitter findet. Der in Abbildung 5.7 abgebildete klassische Zustand entspricht im zweidimensionalen Quadratgitter Abbildung 5.1 (a). Die in Abbildung 5.7 abgebildete Zelle kann als magnetische Einheitszelle genutzt werden. Sie enthält zwei Spins, acht nächste Nachbarbindungen und drei übernächste Nachbarbindungen. Die auf den Ecken liegenden Spins zählen jeweils nur zu einem achtel und die auf den Kanten liegenden Bindungen zu einem viertel. Ist der Abstand zwischen übernächsten Nachbarn zwei, so sind die Randvektoren, welche die magnetische Einheitszelle definieren $\mathbf{a}_1 = (2, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, 2, 0)$ und $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 2)$. Die

Zelle aus Abbildung 5.7 kann auch zur Beschreibung der magnetischen Struktur bei großen Werten des Frustrationsparameters genutzt werden. Mit der gewählten Einheitszelle nimmt der Hamiltonoperator (5.1) in der linearen Spinwellentheorie nach der Fouriertransformation die Gestalt

$$H = s^2 N(-8 + 6p) + s \sum_{\mathbf{k}} \{A_{\mathbf{k}}(\alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{1\mathbf{k}} + \alpha_{2\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2\mathbf{k}}) + B_{\mathbf{k}}(\alpha_{1\mathbf{k}} \alpha_{2-\mathbf{k}} + \alpha_{1\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{2-\mathbf{k}}^\dagger)\} \quad (5.9)$$

an. Die Koeffizienten der Boseoperatoren sind durch

$$A_{\mathbf{k}} = 8 - 6p(1 - \gamma_{2\mathbf{k}}) \quad (5.10)$$

$$B_{\mathbf{k}} = 8\gamma_{1\mathbf{k}} \quad (5.11)$$

gegeben und enthalten die Strukturfaktoren der übernächsten ($\gamma_{2\mathbf{k}}$) und nächsten Nachbarn ($\gamma_{1\mathbf{k}}$)

$$\gamma_{2\mathbf{k}} = \frac{1}{3}[\cos(2k_x) + \cos(2k_y) + \cos(2k_z)] \quad (5.12)$$

$$\gamma_{1\mathbf{k}} = \cos(k_x) \cos(k_y) \cos(k_z) . \quad (5.13)$$

Da nur zwei Bosonen verwendet wurden, kann die Grundzustandsenergie pro Platz analytisch angegeben werden. Sie ist

$$\frac{E_G}{N} = s^2(-8 + 6p) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - A_{\mathbf{k}}) , \quad (5.14)$$

wobei für die Dispersionsrelation $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 - B_{\mathbf{k}}^2}$ gilt. Die Untergittermagnetisierung ergibt sich damit aus

$$m_{\text{UG}}^z = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{1}{2} + \frac{A_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \right) . \quad (5.15)$$

Lineare Spinwellentheorie für große Werte des Frustrationsparameters

Im klassischen J_1 - J_2 -Modell findet man für große Werte von p zwei voneinander entkoppelte Néelgitter. Somit ist der Winkel θ zwischen den beiden Néelgittern ebenso wie beim Quadratgitter beliebig. Die klassische Spineinstellung in der magnetischen Einheitszelle des kubisch raumzentrierten Gitters ist in Abbildung 5.8 zu sehen. Die Kugel um den mittleren Spin symbolisiert die unendlich vielen Einstellungen, welche der mittlere Spin im klassischen Modell einnehmen kann. Der gleichartige klassische Zustand des Quadratgitters ist in Abbildung 5.1 (b) dargestellt. Mit dem beliebigen Winkel θ und $c = \cos(\theta)$ ist der Hamilton-Operator bei großen Werten des Frustrati-

ist die Grundzustandsenergie pro Platz, mit den Dispersionsrelationen

$$\omega_{1\mathbf{k}} = \sqrt{A^2 - 4B_{\mathbf{k}}^2 + F_{\mathbf{k}}} \quad \text{und} \quad \omega_{2\mathbf{k}} = \sqrt{A^2 - 4B_{\mathbf{k}}^2 - F_{\mathbf{k}}} \quad (5.22)$$

sowie der Funktion

$$F_{\mathbf{k}} = \sqrt{(C_{\mathbf{k}}^2 - C_{\mathbf{k}}^{*2}) - 8AB_{\mathbf{k}}(C_{\mathbf{k}}^2 + C_{\mathbf{k}}^{*2}) + 4C_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}^*(A^2 + 4B_{\mathbf{k}}^2)}. \quad (5.23)$$

Für die Untergittermagnetisierung findet man

$$m_{\text{UG}}^z = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{D(\mathbf{k}, \omega_{1\mathbf{k}})}{2\omega_{1\mathbf{k}}(\omega_{1\mathbf{k}}^2 - \omega_{2\mathbf{k}}^2)} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{D(\mathbf{k}, \omega_{2\mathbf{k}})}{2\omega_{2\mathbf{k}}(\omega_{1\mathbf{k}}^2 - \omega_{2\mathbf{k}}^2)} \quad (5.24)$$

mit

$$D(\mathbf{k}, \omega_{1,2\mathbf{k}}) = -\omega_{1,2\mathbf{k}}^3 + A\omega_{1,2\mathbf{k}}^2 - (4B_{\mathbf{k}}^2 - A^2)\omega_{1,2\mathbf{k}} + A(4B_{\mathbf{k}}^2 + 2C_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}^*) - 2B_{\mathbf{k}}(C_{\mathbf{k}}^2 + C_{\mathbf{k}}^{*2}) - A^3. \quad (5.25)$$

In den analytischen Ausdruck der Grundzustandsenergie können nun $\theta = 0, \pi$ sowie ein Winkel θ , der ungleich $0, \pi$ ist, eingesetzt werden. Integriert man die Grundzustandsenergie für die drei Winkel über den Bereich der Brillouin-Zone, so kann man feststellen, dass die Extrema Minima sind. Das Aufheben der unendlichen Entartung durch Quantenfluktuationen findet man auch beim quadratischen Gitter [149, 150]. Die Ergebnisse stimmen mit den in [147] für die Grenzfälle $J_2 = 0$ und $J_1 = 0$ gegebenen Werten des kubisch raumzentrierten und des einfach kubischen Gitters überein. In Abbildung 5.9 und Abbildung 5.10 sind die Ergebnisse der linearen Spinwellentheorie sowie der Extrapolation dargestellt. Die Grundzustandsenergien der linearen Spinwellentheorie und der Extrapolation der kubisch raumzentrierten Gitter sind in guter Übereinstimmung. Da die Standardabweichung in der Größenordnung der Datenpunkte ist, wurde auf eine Darstellung derselbigen verzichtet. Die Grundzustandsenergien der unendlich ausgedehnten Gitter bestätigen die Vermutung, dass sich das $J_1 - J_2$ -Modell auf dem kubisch raumzentrierten Gitter eher klassisch verhält.

Beim extrapolierten Ordnungsparameter sind die Effekte, die auf die Endlichkeit der verwendeten Gitter zurückzuführen sind, bedeutend stärker ausgeprägt als bei der Grundzustandsenergie. Die Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der linearen Spinwellentheorie und der Extrapolation ist mehr qualitativ als quantitativ. Beide Methoden weisen dennoch auf einen Übergang erster Ordnung von der Néelphase zur kollinearen Phase hin. Der Übergangspunkt, den man aus den Daten der exakten Diagonalisierung erhält, liegt bei $J_2 \approx 0.7J_1$ ($p \approx 0.52$) wohingegen die lineare Spinwellentheorie am klassischen Übergangspunkt instabil wird. Unsicher ist, ob das Anwachsen der extrapolierten Magnetisierung in der Nähe des Überganges von großen p her kommend ein physikalischer Effekt ist oder nur durch Randeffekte entsteht. Möglicherweise sind die Untergitter A und B in der Nähe des Überganges stärker aneinander ge-

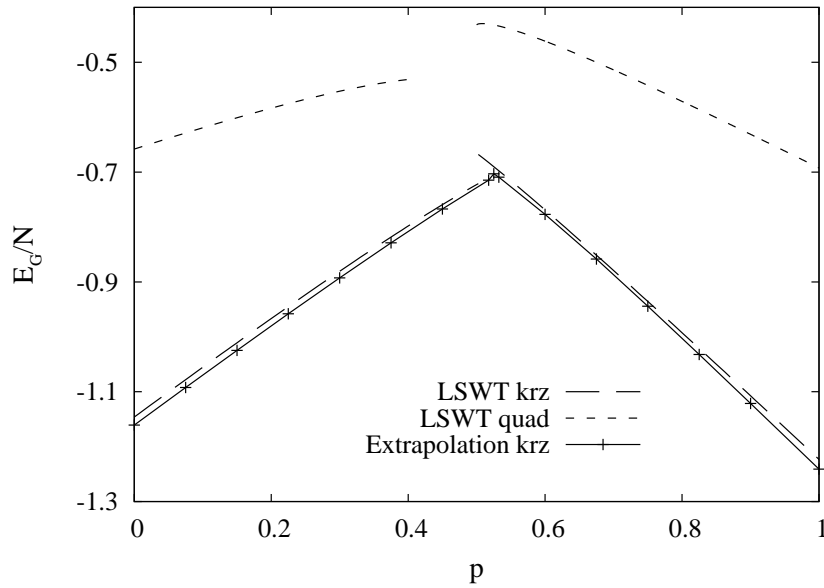


Abbildung 5.9.: Die Grundzustandsenergie pro Platz E_G/N des kubisch raumzentrierten Gitters und des quadratischen Gitters der linearen Spinwellentheorie (lang gestrichelte (LSWT krz) und kurz gestrichelte Linien (LSWT quad)) sowie die Ergebnisse der Extrapolation (durchgezogene Linien mit Datenpunkten (Extrapolation krz)) in Abhängigkeit vom Frustrationsparameter p .

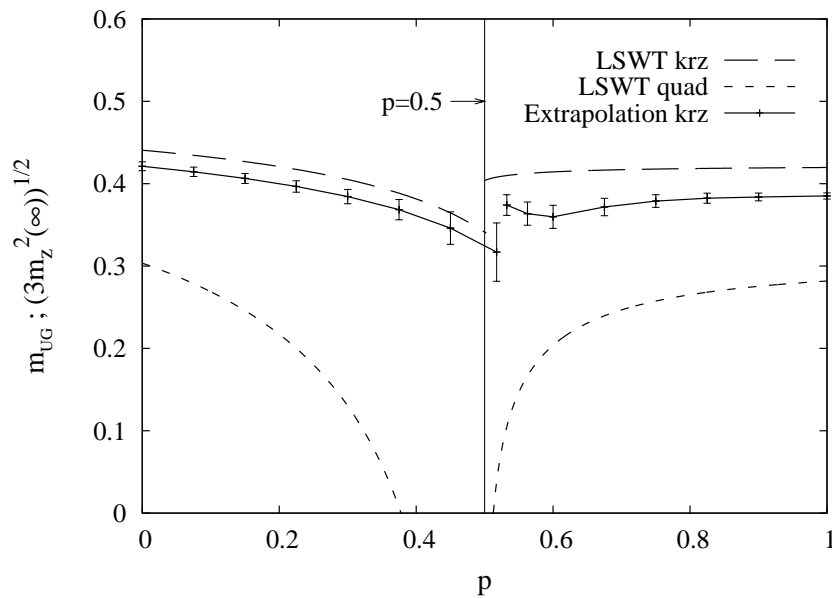


Abbildung 5.10.: Untergittermagnetisierungen m_{UG} der linearen Spinwellentheorie (LSWT) des kubisch raumzentrierten Gitters (lang gestrichelte Linie) und des quadratischen Gitters (kurz gestrichelte Linie) sowie die Untergittermagnetisierung ($\sqrt{3m_z^2(\infty)}$) der Extrapolation (durchgezogene Linie mit Datenpunkten) in Abhängigkeit vom Frustrationsparameter p .

koppelt, da die Frustration die Wirkung der Quantenfluktuationen hervorhebt, welche wiederum die Untergitter A und B aneinanderkoppeln.

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit, die sich mit dem „Einfluss von Dimensionalität und Struktur auf den Grundzustand und die Thermodynamik von Quantenspinsystemen“ beschäftigt, wurden die exakte Diagonalisierung und die lineare Spinwellentheorie zur Berechnung der Eigenschaften der betrachteten Modelle verwendet.

Die Ergebnisse der Arbeit bestätigen, dass mit zunehmender Dimension der Einfluss der Quantenfluktuationen geringer wird. Dies findet seinen Niederschlag in der Feststellung, dass mit größerer Dimension magnetischen Fernordnung häufiger anzutreffen ist. Allerdings ist auch ausschlaggebend, ob die in die nächste Dimension führenden Bindungen die Konkurrenz zwischen den magnetischen Bindungen erhöhen, also frustrierend wirken [28]. Obwohl deutliche Unterschiede zwischen den Dimensionen bestehen, kann man dennoch Erkenntnisse über strukturelle Einflüsse von einer Dimension in eine andere Dimension übertragen. Die Struktur der Systeme ist umso relevanter, je stärker der Einfluss der Quantenfluktuationen ist und maßgeblich für die Eigenschaften der Quantenspinsysteme. Frustration vergrößert bekanntlich den Einfluss der Quantenfluktuationen. Zunehmende thermische Fluktuationen vermindern im Allgemeinen den Grad der Ordnung, wobei ihr Einfluss ebenso wie der der Quantenfluktuationen mit zunehmender Dimension kleiner wird. Es können jedoch auch unter dem Einfluss starker Quantenfluktuationen, d.h. bei tiefen Temperaturen, so genannte „order from disorder“-Effekte auftreten, bei denen das Erhöhen der thermischen Fluktuationen zu mehr Ordnung im System führt [31]. Die thermischen Fluktuationen verringern prinzipiell den Einfluss der Struktur, wodurch die Abstände von Spins bedeutsam werden. Im Gegensatz dazu lassen Quantenfluktuationen Strukturmerkmale hervortreten und Abstände von Spins in den Hintergrund treten. Quantenfluktuationen und thermische Fluktuationen verringern beide die magnetische Ordnung, jedoch gibt es bei $T = 0$ keinen beliebig großen Einfluss der Quantenfluktuationen wie bei den thermischen Fluktuationen im Fall von $T \rightarrow \infty$.

Etwas detaillierter werden nun Ergebnisse der einzelnen Kapitel zusammengefasst.

Im zweiten Kapitel „Nulldimensionale Systeme“ zeigte sich, dass die in diesem Kapitel im Mittelpunkt stehenden frustrierten Systeme, das Kuboktaeder [4] und das Ikosidodekaeder [5–7], besonders tiefliegende Singulett aufweisen, welche auch innerhalb der Singulett-Triplett-Anregungslücke liegen können. Neben dem Kuboktaeder und dem Ikosidodekaeder wurden noch ein Lieb-Mattis-System, ein Ring und ein Quadratgitter als unfrustrierte Systeme und das Oktaeder als frustriertes Lieb-Mattis-System zum Vergleich untersucht. Die Rotationsbänder [57] sind bei stark frustrierten Sys-

temen mit starken Quantenfluktuationen weniger zur Approximation der niedrigsten Energien geeignet. In unfrustrierten Systemen mit weniger Quantenfluktuationen sind die ersten Anregungen klarer von höheren Anregungen separiert als in frustrierten Systemen. Ein qualitativer Unterschied tritt bei den Abweichungen der Rotationsbänder von den niedrigsten Energien auf, die durch die Spektralkoeffizienten [65] beschrieben werden. In den frustrierten Systemen „pendeln“ sie um den klassischen Grenzfall, wohingegen bei den unfrustrierten Systemen außer im extremen Quantenfall bei $s = \frac{1}{2}$ der klassische Grenzfall mit zunehmender Magnetisierung angestrebt wird. Die Grundzustandsmagnetisierungen vieler frustrierter Systeme weisen Plateaus besonderer Größe und einen ungewöhnlich große Sprünge zur vollen Magnetisierung auf. Die Sprünge können der Existenz von lokalisierten Magnonen zugeschrieben werden [49, 75, 76]. Die integrierte Zustandsdichte belegt die bei den frustrierten Systemen deutlich erhöhte Entartung der Grundzustandsenergie am Sättigungsfeld. In den frustrierten Systemen weisen die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen wegen den frustrierenden Dreiecksstrukturen klare Unterschiede zwischen halb- und ganzzahligen Quantenzahlen s auf, während sie ihrem klassischen Wert entgegenstreben [69]. Unter dem Einfluss der thermischen Fluktuationen werden die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen im Allgemeinen geringer und interessanterweise sind sie, was ihre absolute Stärke betrifft, bei hohen Temperaturen den Abständen der Spins entsprechend geordnet. Wie man der Darstellung der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeders entnehmen kann, verstärken die Quantenfluktuationen den Einfluss der frustrierenden Strukturen, woraus sich prinzipielle Veränderungen ergeben, wie z.B. Vorzeichenwechsel bei den Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Stark ausgeprägte Tieftemperatur-Maxima in der spezifischen Wärme bei $h = 0$, die auf die spezielle Lage der niedrig angeregten Singulett zurückzuführen sind, charakterisieren die frustrierten Systeme. Die Gegenüberstellung der spezifischen Wärme und der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen des Kuboktaeder mit $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ in Abhängigkeit von der Temperatur legt den Schluss nahe, dass die Tieftemperatur-Maxima mit den Kreuzungen von Spin-Spin-Korrelationsfunktionen im Zusammenhang stehen. Der Zusammenhang ist noch ungeklärt. Die im Vergleich mit den unfrustrierten Systemen erhöhte Entartung am Sättigungsfeld h_s , welche sich auf die Existenz von lokalisierten Magnonen begründet, bewirkt bei den frustrierten Systemen einen erhöhten magnetokalorischen Effekt. Die ebenfalls in Kapitel 2 untersuchten Lieb-Mattis-Systeme nehmen eine Sonderstellung bei den Quantenspinsystemen ein. Es werden z.B. die tiefsten Energien exakt durch Rotationsbänder beschrieben.

Das Studium des XY-Modells für $s = \frac{1}{2}$ im Übergang von einer zu zwei Dimensionen, was zur Einschätzung der Jordan-Wigner-Transformation in [50] diente, zeigt in Kapitel 3, dass sich im Rahmen der linearen Spinwellentheorie bei unendlich kleinen Bindungen in die zweite Raumrichtung eine magnetische Ordnung ausbildet. Im Kontrast dazu weisen die Ergebnisse der exakten Diagonalisierung auf eine endliche Bindungsstärke hin, ab der die Etablierung der magnetischen Ordnung beginnt. Die Einführung von Bindungen in die zweite Dimension, welche nicht frustrierend wirken, senken zunehmend die Grundzustandsenergie. Sowohl die Grundzustandsenergie als auch die Untergittermagnetisierung bei $T = 0$ deuten auf einen Quantenphasenübergang

zweiter Ordnung beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen hin. In [41] wurden ebenfalls Resultate zur Bindungsstärke, die zu Fernordnung in quasi-eindimensionalen Systemen führt, vorgestellt. Die Autoren fanden, dass für $s = \frac{1}{2}$ -Ketten eine beliebig kleine Bindung genügt, wohingegen für Ketten mit $s = 1$ eine endliche Bindungsstärke zur Ausbildung der Fernordnung notwendig ist.

In Kapitel 4 „Zweidimensionale Systeme“ ist das Augenmerk auf den Übergang zwischen zwei der elf Archimedischen Gitter, dem Bounce-Gitter und dem Maple-Leaf-Gitter [151], gerichtet. Beide Gitter sind wahrscheinlich im Grundzustand geordnet. Zum Maple-Leaf-Gitter existieren bereits interessante Ergebnisse [51], die die Untersuchungen in Kapitel 4 motiviert haben. Zusätzlich eingeführte Bindungen J_M auf einer Diagonalen eines jeden Quadrates des Bounce-Gitters lassen das Maple-Leaf-Gitter entstehen und erhöhen zunächst wegen ihrer frustrierenden Wirkung die Grundzustandsenergie. Ab einem Wert von $J_M \approx 1.0$ nimmt die Grundzustandsenergie bis zum Quantenphasenübergang ab. Nach dem Quantenphasenübergang ist der Grundzustand des Systems ein „Dimer“-Zustand, der sich aus Singulettts zusammensetzt. Diese „Dimer“-Phase, die mit einem einfachen Produktzustand beschrieben werden kann, ist auch im Shastry-Sutherland-Modell zu finden [122,152]. In der „Dimer“-Phase ist die Grundzustandsenergie proportional zur Bindung J_M . Die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen und die Untergittermagnetisierungen deuten, wegen ihres sprunghaften Verhaltens, auf einen Quantenphasenübergang erster Ordnung hin.

Die dritte Dimension verkleinert den Einfluss der Quantenfluktuationen. Während in zwei Dimensionen im J_1 - J_2 -Modell beim Quadratgitter zwischen der Néel-geordneten Phase und der kollinearen Phase eine ungeordnete Phase existiert [52], findet man beim dreidimensionalen kubisch raumzentrierten Gitter einen Quantenphasenübergang erster Ordnung, der die geordneten Phasen ineinander überführt [144]. Der Übergang ist im Bereich der stärksten Frustration anzusiedeln und von derselben Ordnung wie im klassischen Modell. Analog zum Quadratgitter [149,150] heben die Quantenfluktuationen beim kubisch raumzentrierten Gitter die unendliche Entartung des klassischen Zustandes in der kollinearen Phase auf.

Das Heisenberg-Modell in seinen Varianten beschreibt eine Vielfalt von magnetischen Phänomenen und hält aufgrund seiner Komplexität, die auf dem Vielteilchen-Charakter des Modells beruht, noch viele interessante Entdeckungen bereit. Es bietet die Möglichkeit den Einfluss des Zusammenspiels von Quantenfluktuationen und Frustration auf die magnetische Ordnung für unterschiedlichste Gitter-Strukturen zu studieren. Die hier verwendeten Methoden, insbesondere die exakte Diagonalisierung mit dem Programm spinpack, offerieren effiziente Verfahren solche Fragestellungen zu untersuchen.

ANHANG A

KOORDINATENTRANSFORMATION

Nach [53] geht ein kartesisches Koordinatensystem $\sum' = \{0, s^{x'}, s^{y'}, s^{z'}\}$ durch eine Drehung (im mathematisch positiven Sinn) um die durch den Ursprung gehende Achse g mit den Richtungskosinus

$$\cos(\sphericalangle s^{x'}, g) = \alpha , \quad (\text{A.1})$$

$$\cos(\sphericalangle s^{y'}, g) = \beta , \quad (\text{A.2})$$

$$\cos(\sphericalangle s^{z'}, g) = \gamma \quad (\text{A.3})$$

und um den Winkel θ in das kartesische Koordinatensystem $\sum = \{0, s^x, s^y, s^z\}$ durch folgende Umrechnungsformeln über:

$$s^{x'} = s^x(\cos \theta + \alpha^2(1 - \cos \theta)) + s^y(\gamma \sin \theta + \alpha\beta(1 - \cos \theta)) + s^z(-\beta \sin \theta + \alpha\gamma(1 - \cos \theta)) , \quad (\text{A.4})$$

$$s^{y'} = s^x(-\gamma \sin \theta + \beta\alpha(1 - \cos \theta)) + s^y(\cos \theta + \beta^2(1 - \cos \theta)) + s^z(\alpha \sin \theta + \beta\gamma(1 - \cos \theta)) , \quad (\text{A.5})$$

$$s^{z'} = s^x(\beta \sin \theta + \gamma\alpha(1 - \cos \theta)) + s^y(-\alpha \sin \theta + \gamma\beta(1 - \cos \theta)) + s^z(\cos \theta + \gamma^2(1 - \cos \theta)) . \quad (\text{A.6})$$

In der Spinwellentheorie wird die $s^{z'}$ -Achse als Quantisierungsachse verwendet. Das bedeutet, alle klassischen Spins sind so zu drehen, dass sie ausschließlich aus einer Komponente, welche in der $s^{z'}$ -Achse liegt, bestehen.

Betrachtet man die s^z - und die $s^{z'}$ -Achse der Systeme \sum und \sum' als klassische Spins, so stellt man fest, dass man die Freiheit hat die s^y -Achse in die $s^{x'}$ - $s^{y'}$ -Ebene zu drehen, ohne dass sich der Winkel zwischen der s^z - und der $s^{z'}$ -Achse ändert. Legt man nun noch die Gerade g durch die s^y -Achse, so kann durch eine Drehung um den Winkel θ , s^z in $s^{z'}$ überführt werden. Die Richtungskosinus sind dementsprechend $\alpha = 0$, $\beta = 1$ und $\gamma = 0$. Durch eine weitere Drehung um die s^z -Achse, welche jetzt mit der $s^{z'}$ -Achse identisch ist, kann die s^y -Achse mit der $s^{y'}$ -Achse in Übereinstimmung gebracht werden. Somit lauten die Transformationen für einen Spin am Platz β :

$$s_{\beta}^{x'} = s_{\beta}^x \cos \theta - s_{\beta}^z \sin \theta \quad (\text{A.7})$$

$$s_{\beta}^{y'} = s_{\beta}^y \quad (\text{A.8})$$

$$s_{\beta}^{z'} = s_{\beta}^x \sin \theta + s_{\beta}^z \cos \theta . \quad (\text{A.9})$$

Die beschriebene Herangehensweise ist für dreidimensionale und zweidimensionale klassische Spinkonfigurationen gültig. Sind die klassischen Spins komplanar, wie es beim Bounce-Gitter der Fall ist, dann kann die s^y -Achse gleich der $s^{y'}$ -Achse gesetzt werden, wodurch ebenfalls nur θ als offener Winkel verbleibt.

ANHANG B

OCTAVE-PROGRAMM

Ist die Anzahl der Spins in der „magnetischen“ Einheitszelle und damit die Anzahl der den Spins zugeordneten bosonischen Operatoren, die für die lineare Spinwellentheorie verwendet werden, größer als zwei so kann es schwierig werden analytische Ausdrücke für den diagonalisierten Hamilton-Operator zu erhalten. Im Gegensatz zu Kapitel 3 und Kapitel 5 ist die Anzahl sechs, der unterschiedlichen bosonischen Operatoren, die zur linearen Spinwellentheorie beim Bounce-Gitter in Kapitel 4 verwendet werden zu groß, um analytische Aussagen machen zu können. Mit dem folgenden Programm, das nach einer Idee von Dr. Dirk Schmalfuß entstand, kann mittels Octave [128] die Energie und die Magnetisierung des Bounce-Gitters bei $T = 0$ unter Verwendung der Gauss-Legendre-Quadratur bestimmt werden. Die zur Diagonalisierung des Hamilton-Operators aufgestellte Matrix ist eine 6×6 -Matrix, die für jeden einzelnen zur numerischen Integration verwendeten Wert k_x und k_y diagonalisiert wird.

Programm:

```
#Autor: Reimar Schmidt 03.06.08 (TT.MM.JJ)
#Programm zur Berechnung der Grundzustandsenergie und der
#Untergittermagnetisierung
for l=1:10;# Anzahl der Intervalle in die das Integral zerlegt wird
format long;
function retval = f(kx,ky);
#####
## Transformation auf Intervall -1 bis +1 nach
## qx=(1/2)*(ogx-ugx)tx+(1/2)(ugx+ogx) etc.
qx=(pi*(kx+1))/(sqrt(3)*(1+sqrt(3)));
qy=(pi*(3-kx)*ky)/(3*(1+sqrt(3)));
q=[qx,qy];
#####
## Vektoren dj und die Koeffizienten gj und gjs
d1=1/2*[1;sqrt(3)];
d2=1/2*[-sqrt(3);1];
d3=1/2*[1;-sqrt(3)];
d4=[1;0];
d5=[0;1];
d6=1/2*[sqrt(3);1];
g1=exp(I*q*d1);
```

```

g1s=exp(-I*q*d1);
g2=exp(I*q*d2);
g2s=exp(-I*q*d2);
g3=exp(I*q*d3);
g3s=exp(-I*q*d3);
g4=exp(I*q*d4);
g4s=exp(-I*q*d4);
g5=exp(I*q*d5);
g5s=exp(-I*q*d5);
g6=exp(I*q*d6);
g6s=exp(-I*q*d6);
#####
## Zu diagonalisierende Matrix
M=[\
3,0,g6/4,0,g2s/4,0,0,-g1s,-(3/4)*g6,0,-(3/4)*g2s,-g3s;\
0,3,0,g2s/4,0,g5s/4,-g1,0,-g4s,-(3/4)*g2s,0,-(3/4)*g5s;\
g6s/4,0,3,0,g5s/4,0,-(3/4)*g6s,-g4,0,-g3s,-(3/4)*g5s,0;\
0,g2/4,0,3,0,g6s/4,0,-(3/4)*g2,-g3,0,-g1,-(3/4)*g6s;\
g2/4,0,g5/4,0,3,0,-(3/4)*g2,0,-(3/4)*g5,-g1s,0,-g4;\
0,g5/4,0,g6/4,0,3,-g3,-(3/4)*g5,0,-(3/4)*g6,-g4s,0;\
0,g1s,(3/4)*g6,0,(3/4)*g2s,g3s,-3,0,-g6/4,0,-g2s/4,0;\
g1,0,g4s,(3/4)*g2s,0,(3/4)*g5s,0,-3,0,-g2s/4,0,-g5s/4;\
(3/4)*g6s,g4,0,g3s,(3/4)*g5s,0,-g6s/4,0,-3,0,-g5s/4,0;\
0,(3/4)*g2,g3,0,g1,(3/4)*g6s,0,-g2/4,0,-3,0,-g6s/4;\
(3/4)*g2,0,(3/4)*g5,g1s,0,g4,-g2/4,0,-g5/4,0,-3,0;\
g3,(3/4)*g5,0,(3/4)*g6,g4s,0,0,-g5/4,0,-g6/4,0,-3];
#####
## Energie
#eva=eig(M);
#sumeva=0;
#for k=1:12
#sumeva=sumeva+abs(eva(k));
#endfor
#retval=(3-kx)*sumeva/2;
#####
## Magnetisierung
[V,D]=eig(M);
for i=1:12
if (D(i,i)>0)
tsq(i)=1/(V(1,i)*conj(V(1,i))+V(2,i)*conj(V(2,i))\
+V(3,i)*conj(V(3,i))+V(4,i)*conj(V(4,i))\
+V(5,i)*conj(V(5,i))+V(6,i)*conj(V(6,i))\
-V(7,i)*conj(V(7,i))-V(8,i)*conj(V(8,i))\

```

```
-V(9,i)*conj(V(9,i))-V(10,i)*conj(V(10,i))\  
-V(11,i)*conj(V(11,i))-V(12,i)*conj(V(12,i));  
e1(i)=V(1,i)*sqrt(tsq(i));  
e2(i)=V(2,i)*sqrt(tsq(i));  
e3(i)=V(3,i)*sqrt(tsq(i));  
e4(i)=V(4,i)*sqrt(tsq(i));  
e5(i)=V(5,i)*sqrt(tsq(i));  
e6(i)=V(6,i)*sqrt(tsq(i));  
e7(i)=V(7,i)*sqrt(tsq(i));  
e8(i)=V(8,i)*sqrt(tsq(i));  
e9(i)=V(9,i)*sqrt(tsq(i));  
e10(i)=V(10,i)*sqrt(tsq(i));  
e11(i)=V(11,i)*sqrt(tsq(i));  
e12(i)=V(12,i)*sqrt(tsq(i));  
else  
e1(i)=0;  
e2(i)=0;  
e3(i)=0;  
e4(i)=0;  
e5(i)=0;  
e6(i)=0;  
e7(i)=0;  
e8(i)=0;  
e9(i)=0;  
e10(i)=0;  
e11(i)=0;  
e12(i)=0;  
endif  
endfor;  
apa\  
=conj(e7(1))*e7(1)\  
+conj(e7(2))*e7(2)\  
+conj(e7(3))*e7(3)\  
+conj(e7(4))*e7(4)\  
+conj(e7(5))*e7(5)\  
+conj(e7(6))*e7(6);  
retval=(3-kx)*apa;  
#####  
return;  
endfunction;  
#####  
global int=0;  
#####
```

```

oberegrenzex=+1;
unteregrenzex=-1;
oberegrenzey=+1;
unteregrenzey=-1;
#####
n=1;
stepx=(oberegrenzex-unteregrenzex)/n;
stepy=(oberegrenzey-unteregrenzey)/n;
for i=1:n
for j=1:n
ogx=(unteregrenzex+i*stepx);
ugx=(unteregrenzex+(i-1)*stepx);
ogy=(unteregrenzey+j*stepy);
ogy=(unteregrenzey+(j-1)*stepy);
t0=-0.90617985;
t1=-0.53846931;
t2=0.00000000;
t3=+0.53846931;
t4=+0.90617985;
A0=0.23692689;
A1=0.47862867;
A2=0.56888889;
A3=0.47862867;
A4=0.23692689;
kx0=(1/2)*(ogx-ugx)*t0+(1/2)*(ogx+ugx);
kx1=(1/2)*(ogx-ugx)*t1+(1/2)*(ogx+ugx);
kx2=(1/2)*(ogx-ugx)*t2+(1/2)*(ogx+ugx);
kx3=(1/2)*(ogx-ugx)*t3+(1/2)*(ogx+ugx);
kx4=(1/2)*(ogx-ugx)*t4+(1/2)*(ogx+ugx);
ky0=(1/2)*(ogy-ogy)*t0+(1/2)*(ogy+ogy);
ky1=(1/2)*(ogy-ogy)*t1+(1/2)*(ogy+ogy);
ky2=(1/2)*(ogy-ogy)*t2+(1/2)*(ogy+ogy);
ky3=(1/2)*(ogy-ogy)*t3+(1/2)*(ogy+ogy);
ky4=(1/2)*(ogy-ogy)*t4+(1/2)*(ogy+ogy);
intxy=((ogx-ugx)/2)*((ogy-ogy)/2)*(\
A0*A0*f(kx0,ky0)+A0*A1*f(kx0,ky1)+A0*A2*f(kx0,ky2)\
+A0*A3*f(kx0,ky3)+A0*A4*f(kx0,ky4)\
+A1*A0*f(kx1,ky0)+A1*A1*f(kx1,ky1)+A1*A2*f(kx1,ky2)\
+A1*A3*f(kx1,ky3)+A1*A4*f(kx1,ky4)\
+A2*A0*f(kx2,ky0)+A2*A1*f(kx2,ky1)+A2*A2*f(kx2,ky2)\
+A2*A3*f(kx2,ky3)+A2*A4*f(kx2,ky4)\
+A3*A0*f(kx3,ky0)+A3*A1*f(kx3,ky1)+A3*A2*f(kx3,ky2)\
+A3*A3*f(kx3,ky3)+A3*A4*f(kx3,ky4)\

```



```
+A4*A0*f(kx4,ky0)+A4*A1*f(kx4,ky1)+A4*A2*f(kx4,ky2)\
+A4*A3*f(kx4,ky3)+A4*A4*f(kx4,ky4));
int=int+intxy;
endfor;
endfor;
s=1/2;
#####
## Ausgabe der Intervalle n, der Energie und der Magnetisierung
n
#E=-(3/2)*s*(s+1)+(s/2)*(1/72)*int
m=s-(1/12)*int
#E=0;
m=0;
int=0;
endfor;
```

Die Energien konvergieren recht schnell. Sie können schon für $n < 10$ bis zur dritten Stelle nach dem Komma angegeben werden. Um die gleiche Genauigkeit bei der Magnetisierung zu erreichen, sind hingegen bedeutend mehr Intervalle zu verwenden. Erfahrungswerte zeigen, dass ungefähr $n \approx 1000$ zu einer Genauigkeit von drei Stellen nach dem Komma führt.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] J. H. V. VLECK. *The Theory of Electric and Magnetic Suszeptibilities*. Oxford, 1932.
- [2] W. HEISENBERG, Z. Physik **49** (1928) 619.
- [3] U. SCHOLLWÖCK, J. RICHTER, D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP. *Quantum Magnetism; Lecture Notes in Physics Vol. 645*. Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [4] A. J. BLAKE, R. O. GOULD, C. M. CRANT, P. E. Y. MILNE, S. PARSONS, R. E. P. WINPENNY, J. Chem. Soc., Dalton Trans. **4** (1997) 485.
- [5] A. MÜLLER, S. SARKAR, S. Q. N. SHAH, H. BÖGGE, M. SCHMIDTMANN, S. SARKAR, P. KÖGERLER, B. HAUPTFLEISCH, A. X. TRAUTWEIN, V. SCHÜNEMANN, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **38** (1999) 3238.
- [6] A. MÜLLER, M. LUBAN, C. SCHRÖDER, R. MODLER, P. KÖGERLER, M. AXENOVICH, J. SCHNACK, P. C. CANFIELD, S. BUD'KO, N. HARRISON, Chem. Phys. Chem. **2** (2001) 517.
- [7] A. MÜLLER, A. M. TODEA, J. VAN SLAGEREN, M. DRESSEL, H. BÖGGE, M. SCHMIDTMANN, M. LUBAN, L. ENGELHARDT, M. RUSU, Angew. Chem., Int. Ed. **44** (2005) 3857.
- [8] J. SCHNACK, R. SCHMIDT, J. RICHTER, Phys. Rev. B **76** (2007) 054413.
- [9] T. MASUDA, A. ZHELUDEV, A. BUSH, M. MARKINA, A. VASILIEV, Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 039706.
- [10] M. ENDERLE, C. MUKHERJEE, B. FAK, R. K. KREMER, J.-M. BROTO, H. ROSNER, S.-L. DRECHSLER, J. RICHTER, J. MÁLEK, A. PROKOFIEV, W. ASSMUS, S. PUJOL, J.-L. RAGGOZZONI, H. RAKOTO, M. RHEINSTÄDTER, H. M. RØNNOW, Europhys. Lett. **70** (2005) 273.
- [11] S.-L. DRECHSLER, O. VOLKOVA, A. N. VASILIEV, N. TRISTAN, J. RICHTER, M. SCHMITT, H. ROSNER, J. MÁLEK, R. KLINGELER, A. A. ZVYAGIN, B. BÜCHNER, Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 077202.
- [12] H. KIKUCHI, Y. FUJII, M. CHIBA, S. MITSUDO, T. IDEHARA, T. TONEGAWA, K. OKAMOTO, D. SAKAI, D. KUWAI, H. OHTA, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 089701.
- [13] H. KIKUCHI, Y. FUJII, M. CHIBA, S. MITSUDO, T. IDEHARA, T. TONEGAWA, K. OKAMOTO, D. SAKAI, D. KUWAI, H. OHTA, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 089702.

- [14] H. KIKUCHI, Y. FUJII, M. CHIBA, S. MITSUDO, T. IDEHARA, T. TONEGAWA, K. OKAMOTO, D. SAKAI, D. KUWAI, K. KINDO, A. MATSUO, W. HIGEMOTO, K. NISHIYAMA, M. HORVAT'IC, C. BERTHEIR, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159** (2005) 1.
- [15] R. MELZU, P. CARRETTA, A. LASCIALFARI, M. MAMBRINI, M. TROYER, P. MILLET, F. MILA, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1318.
- [16] H. ROSNER, R. R. P. SINGH, W. H. ZHENG, J. OITMAA, S.-L. DRECHSLER, W. E. PICKET, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 186405.
- [17] R. COLDEA, D. A. TENNANT, A. M. TSVELIK, Z. TYLCZYNSKI, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 1335.
- [18] P. MENDELS, F. BERT, M. A. DE VRIES, A. OLARIU, A. HARRISON, F. DUC, J. C. TROMBE, J. S. LORD, A. AMATO, C. BAINES, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 077204.
- [19] S. TANGUCHI, T. NISHIKAWA, Y. YASUI, Y. KOBAYASHI, M. SATO, T. NISHIOKA, M. KONTANI, K. SANO, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64** (1995) 2758.
- [20] H. KAGEYAMA, K. YOSHIMURA, R. STERN, N. V. MUSHNIKOV, K. ONIZUKA, M. KATO, K. KOSUGE, C. P. SLICHTER, T. GOTO, Y. UEDA, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1999) 2758.
- [21] T. MOMOI K. TOTSUKA, *Phys. Rev. B* **61** (2000) 3231.
- [22] K. ONIZUKA, H. KAGEYAMA, Y. NARUMI, K. KINDO, Y. UEDA, T. GOTO, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69** (2000) 1016.
- [23] T. BARNES, *J. Mod. Phys. C* **2** (1991) 659.
- [24] E. MANOUSAKIS, *Rev. Mod. Phys.* **63** (1991) 1.
- [25] E. DAGOTTO, *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994) 763.
- [26] J. TANAKA, T. ONO, H. A. KATORI, H. MITAMURA, F. ISHIKAWA, T. GOTO, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **145** (2002) 101.
- [27] P. LEMMENS P. MILLET. *Spin - Orbit - Topology, a Triptych, in: U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, (Eds.) Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics, vol. 645.* Springer-Verlag, Berlin, 2004. pp. 433-469.
- [28] M. ISOBE Y. UEDA, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002) 1848.
- [29] D. SCHMALFUSS, R. D. AN J. RICHTER, J. SCHULENBURG, D. IHLE, *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006) 157201.
- [30] M. D. JOHANNES, J. RICHTER, S.-L. DRECHSLER, H. ROSNER, *Phys. Rev. B.* **74** (2006) 174435.
- [31] A. F. VOIGT. *Grundzustand und Thermodynamik frustrierter Quantenspinsysteme.* Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg, Deutschland, 1999.

- [32] F. D. M. HALDANE, Phys. Rev. Lett. A **93** (1983) 464.
- [33] J. HUBBARD, Proc. Roy. Soc **276** (1963) 238.
- [34] H. BETHE, Z. Phys. **71** (1931) 205.
- [35] H.-J. MIKESKA A. K. KOLEZHUK. *One-Dimensional Magnetism, in: U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, (Eds.) Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics, vol. 645.* Springer-Verlag, Berlin, 2004. pp. 1-55.
- [36] N. MERMIN H. WAGNER, Phys. Rev. Lett. **17** (1966) 1133.
- [37] I. AFFLECK, M. P. GELFAND, R. R. P. SINGH, J. Phys. A **27** (1994) 7313.
- [38] T. MIYAZAKI, D. YOSHIOKA, M. OGATA, Phys. Rev. B **51** (1995) 2966.
- [39] D. IHLE, C. SCHINDELIN, A. WEISSE, H. FEHSKE, Phys. Rev. B **60** (1999) 9240.
- [40] L. CAPRIOTTI F. BECCA, Phys. Rev. B **65** (2002) pages 092406–1.
- [41] R. ZINKE, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, Eur. Phys. J. B **61** (2008) 2008.
- [42] E. F. SHENDER, Sov. Phys. JETP **56** (1982) 178.
- [43] J. VILLAIN, R. BIDAUX, J. P. CARON, R. CONTE, J. Physique **41** (1980) 1263.
- [44] C. LANCZOS, J. Res. Natl. Bur. Stnd. **45** (1950) 255.
- [45] C. C. PAIGE, J. Inst. Maths. Appl. **10** (1972) 373.
- [46] J. K. COLLUM R. A. WILLOUGHBY. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Comutations.* Birkhäuser, 1985.
- [47] J. SCHULENBURG. *Einfluß der Gitterstruktur auf den Grundzustand von $s=1/2$ -Quantenspinsystemen.* Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg, Deutschland, 2003. URL: <http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/diss.html>.
- [48] J. SCHULENBURG. *SPINPACK.* Abruf: 19.02.07. <http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/spin/index.html>.
- [49] J. SCHNACK. *Molekular magnetism, in: U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, (Eds.) Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics, vol. 645.* Springer-Verlag, Berlin, 2004. pp. 155-194.
- [50] O. DERZHKO, T. VERKHOLYAK, R. SCHMIDT, J. RICHTER, Physica A **320** (2002) 407.
- [51] D. SCHMALFUSS, P. TOMCZAK, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, Phys. Rev. B **65** (2002) 224405.
- [52] J. RICHTER, Phys. Rev. B. **47** (1993) 5794.

- [53] I. N. BRONSTEIN K. A. SEMENDJAJEW. *Taschenbuch der Mathematik*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart · Leipzig, 1991.
- [54] PLATON, Timaios, 52d-57d.
- [55] *Archimedische Körper*. Abruf: 19.02.07. <http://www.mathe.tu-freiberg.de/~hebisch/cafe/archimedische.html>.
- [56] *Archimedischer Körper - Wikipedia*. Abruf: 19.02.07. Suche: Archimedischer Körper <http://de.wikipedia.org/wiki/Hauptseite>.
- [57] J. SCHNACK M. LUBAN, Phys. Rev. B **63** (2000) 014418.
- [58] K. L. TAFT, C. D. DELFS, G. C. PAPAETHYMIU, S. FONER, D. GATTESCHI, S. J. LIPPARD, Phys. Rev. B **55** (1994) 823.
- [59] A. LASCIALFARI, D. GATTESCHI, F. BORSA, A. CORNIA, Phys. Rev. B **55** (1997) 14341.
- [60] A. LASCIALFARI, D. GATTESCHI, F. BORSA, A. CORNIA, Phys. Rev. B **55** (1997) 8434.
- [61] G. L. ABBATI, A. CANESCHI, A. CORNIA, A. C. FABRETTI, D. GATTESCHI, Inorg. Chim. Acta **297** (2000) 291.
- [62] B. BERNU, P. LECHEMINANT, C. LHUILLIER, L. PIERRE, Phys. Rev. B **50** (1994) 10048.
- [63] H.-J. SCHMIDT M. LUBAN, J. Phys. A **36** (2003) 6351.
- [64] J. SCHNACK, M. LUBAN, R. MODLER, Europhys. Lett **56** (2001) 863.
- [65] L. ENGELHARDT M. LUBAN, Phys. Rev. B **73** (2006) 054430.
- [66] O. WALDMANN, Phys. Rev. B **65** (2001) 024424.
- [67] S. E. KRÜGER. *Thermodynamik des LIEB-MATTIS-Modells mit Frustration*. Forschungsbeleg, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg, Deutschland, 1993.
- [68] J. RICHTER A. VOIGT, J. Phys. A: Math. Gen. **27** (1993) 1993.
- [69] R. SCHMIDT, J. RICHTER, J. SCHNACK, J. Magn. Magn. Mater. **295** (2005) 164.
- [70] J. SCHNACK, H.-J. SCHMIDT, J. RICHTER, J. SCHULENBURG, Eur. Phys. J. B **24** (2001) 475.
- [71] S. R. WHITE, Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [72] I. PESCHEL, X. WANG, M. KAULKE, K. HALLBERG. *Density-Matrix Renormalization*. Springer, Berlin, 1999.
- [73] U. SCHOLLWÖCK, Rev. Mod. Phys. (2004).

- [74] O. CÉPAS T. ZIMAN, Prog. Theor. Phys. Suppl. **159** (2005) 280.
- [75] J. SCHULENBURG, A. HONECKER, J. SCHNACK, J. RICHTER, H.-J. SCHMIDT, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 167207.
- [76] J. RICHTER, J. SCHULENBURG, A. HONECKER. *Quantum magnetism in two dimensions: From semi-classical Néel order to magnetic disorder*, in: U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, (Eds.) *Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics*, vol. 645. Springer-Verlag, Berlin, 2004. pp. 85-183, <http://www.tu-bs.de/honecker/papers/2dqm.ps.gz>.
- [77] A. HONECKER, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, J. Phys.: Condens. Matter **16** (2004) 749.
- [78] W. F. GIAUQUE D. MACDOUGALL, Phys. Rev. **43** (1933) 768.
- [79] V. K. PEACHARSKY K. A. GSCHNEIDNER, J. Magn. Magn. Mater. **200** (1999) 44.
- [80] M. E. ZHITOMIRSKY, Phys. Rev. B **67** (2003) 104421.
- [81] V. K. PEACHARSKY K. A. GSCHNEIDNER, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 4494.
- [82] M. E. ZHITOMIRSKY A. HONECKER, J. Stat. Mech.: Theory Exp. (2004).
- [83] O. WALDMANN, R. KOCH, S. SCHROMM, P. MÜLLER, I. BERNT, R. W. SAALFRANK, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 246401.
- [84] L. J. ZHU, M. GARST, A. ROSCH, Q. M. SI, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 066404.
- [85] O. DERZHKO J. RICHTER, Phys. Rev. B **70** (2003) 104415.
- [86] M. E. ZHITOMIRSKY H. TSUNETSUGU, Prog. Theor. Phys. Suppl. **160** (2005) 361.
- [87] J. SCHNACK, H.-J. SCHMIDT, A. HONECKER, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, J. Phys.: Conference Series **51** (2006) 43.
- [88] E. FRADKIN, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 322.
- [89] A. LOPEZ, A. G. ROJO, E. FRADKIN, Phys. Rev. B **49** (1994) 15139.
- [90] E. FRADKIN. *Field Theories of Condensed Matter Systems*. Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, California Menlo Park, California Reading, Massachusetts, New York, Don Mills, Ontario, Workingham, United Kingdom, Amsterdam, Bonn, Sydney, Singapore, Tokyo, Madrid, San Juan, 1991. (Chapter 7).
- [91] Y. R. WANG, Phys. Rev. B **43** (1991) 3786.
- [92] Y. R. WANG, Phys. Rev. B **43** (1991) 13774.
- [93] Y. R. WANG, Phys. Rev. B **46** (1992) 151.
- [94] M. AZZOUZ, Phys. Rev. B **48** (1993) 6136.

- [95] M. AZZOUZ, L. CHEN, S. MOUKOURI, Phys. Rev. B **50** (1994) 6233.
- [96] M. AZZOUZ C. BOURBONNAIS, Phys. Rev. B **53** (1996) 5090.
- [97] M. AZZOUZ, B. DUMOULIN, A. BENYOUSSEF, Phys. Rev. B **55** (1997) R11957.
- [98] B. BOCK M. AZZOUZ, Phys. Rev. B **64** (2001) pages 054410–1.
- [99] W. SHAOFENG, Phys. Rev. E **51** (1995) 1004.
- [100] M. S. KOCHMAŃSKI, J. Tech. Phys. (Warsaw) **36** (1995) 485.
- [101] M. S. KOCHMAŃSKI, Phys. Rev. E **56** (1997) 3831.
- [102] C. D. BATISTA G. ORTIZ, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 1082.
- [103] Y. JI, J. QI, J.-X. LI, C.-D. GONG, J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 2259.
- [104] X.-J. FAN C.-D. GONG, Eur. Phys. J. B **7** (1999) 233.
- [105] Q. YUAN, Y. ZHANG, H. CHEN, Phys. Rev. B **64** (2001) pages 012414–1.
- [106] G. MISGUICH, T. JOLICOEUR, S. GIRVIN, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) pages 097203–1.
- [107] G. GOMEZ-SANTOS J. D. JOANNOPOULOS, Phys. Rev. B **36** (1987) 8707.
- [108] P. HASENFRATZ F. NIEDERMAYER, Z. Phys. B: Condens. Matter **92** (1993) 91.
- [109] C. J. HAMER, T. HÖVELBORN, M. BACHHUBER, J. Phys. A **32** (1999) 51.
- [110] A. W. SANDVIK C. J. HAMER, Phys. Rev. B **60** (1999) 6588.
- [111] C. J. HAMER, J. Phys. A **19** (1999) 3335.
- [112] Y. NONOMURA, J. Magn. Magn. Mater **140-144** (1995) 1495.
- [113] F. COESTER H. KÜMMEL, Nucl. Phys. **7** (1969) 477.
- [114] R. F. BISHOP, Theor. Cim. Acta **80** (1991) 95.
- [115] D. J. J. FARNELL R. F. BISHOP. *The Coupled Cluster Method Applied to Quantum Magnetism*, in: U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, (Eds.) *Quantum Magnetism, Lecture Notes in Physics*, vol. 645. Springer-Verlag, Berlin, 2004. pp. 307-348.
- [116] J. RICHTER, R. DARRADI, R. ZINKE, R. F. BISHOP, Int. J. Modern Phys. B **21** (2007) 2273.
- [117] C. ZENG, D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP, J. Stat. Phys. **90** (1998) 327.
- [118] R. F. BISHOP, D. J. J. FARNELL, S. E. KRÜGER, J. B. PARKINSON, J. RICHTER, C. ZENG, J. Phys. Condens. Matter **12** (2000) 6887.

- [119] S. E. KRÜGER, J. RICHTER, J. SCHULENBURG, D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP, Phys. Rev. B **61** (2000) 14607.
- [120] D. J. J. FARNELL, R. F. BISHOP, K. A. GERNOTH, J. Stat. Phys. **108** (2002) 401.
- [121] D. J. J. FARNELL, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, K. A. GERNOTH, Phys. Rev. B **72** (2005) 172408.
- [122] R. DARRADI, J. RICHTER, D. J. J. FARNELL, Phys. Rev. B **72** (2005) 2005.
- [123] S. E. KRÜGER, R. DARRADI, J. RICHTER, D. J. J. FARNELL, Phys. Rev. B **73** (2006) 094404.
- [124] P. N. SUDING R. M. ZIFF, Phys. Rev. E **60** (1999) pages 275–283.
- [125] T. HOLSTEIN H. PRIMAKOFF, Phys. Rev. **58** (1940) 1098.
- [126] D. P. SCHMALFUSS. *Analytische Verfahren zur Untersuchung von Quantenspinsystemen: rotationsinvariante Greenfunktionsmethode und lineare Spinwellentheorie*. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg, Deutschland, 2003.
- [127] J. H. P. COLPA, Physica **93A** (1978) pages 327–353.
- [128] *Octave*. Abruf: 11.04.07. <http://www.octave.org>.
- [129] D. D. BETTS, PROC. N.S. INST. SCI. **40**, no. 2 (1995) pages 95–100.
- [130] P. CHANDRA B. DOUCOT, Phys. Rev. B. **38** (1988) 1133.
- [131] H. J. SCHULZ T. A. L. ZIMAN, Europhys. Lett. **18** (1992) 355.
- [132] K. RETZLAFF, J. RICHTER, N. B. IVANOV, Z. Phys. B: Condens. Matter **93** (1993) 21.
- [133] J. RICHTER, N. B. IVANOV, K. RETZLAFF, Europhys. Lett. **25** (1994) 545.
- [134] R. F. BISHOP, D. J. J. FARNELL, J. B. PARKINSON, Phys. Rev. B. **58** (1998) 6394.
- [135] R. R. P. SINGH, Z. WEIHONG, C. J. HAMER, J. OITMAA, Phys. Rev. B. **60** (1999) 7278.
- [136] V. N. KOTOV O. P. SUSHKOV, Phys. Rev. B. **61** (2000) 820.
- [137] L. CAPRIOTTI S. SORELLA, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 3173.
- [138] O. P. SUSHKOV, J. OITMAA, Z. WEIHONG, Phys. Rev. B. **63** (2001) 104420.
- [139] L. CAPRIOTTI, F. BECCA, A. PAROLA, S. SORELLA, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 097201.
- [140] G. E. STEWART, D. D. BETTS, J. S. FLYNN, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3231.
- [141] D. D. BETTS, J. SCHULENBURG, G. E. STEWART, J. RICHTER, J. S. FLYNN, J. Phys. A **31** (1998) 7685.

-
- [142] J. SCHULENBURG, J. S. FLYNN, D. D. BETTS, J. RICHTER, *Eur. Phys. J. B* **21** (2001) 191.
- [143] H. J. SCHULZ, T. A. L. ZIMAN, D. POIBLANC, *J. Phys. I* **6** (1996) 675.
- [144] R. SCHMIDT, J. SCHULENBURG, J. RICHTER, D. D. BETTS, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 224406.
- [145] W. MARSHALL, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **232** (1955) 48.
- [146] H. NEUBERGER T. ZIMAN, *Phys. Rev. B* **39** (1989) 2608.
- [147] J. OITMAA, C. J. HAMER, Z. WEIHONG, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 3877.
- [148] R. P. FEYNMANN, *Phys. Rev.* **50** (1939) 340.
- [149] K. KUBO T. KISHI, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** (1990) 567.
- [150] A. MOREO, E. DAGOTTO, T. JOLICOEUR, J. RIERA, *Phys. Rev. B* **42** (1990) 6283.
- [151] D. CAVE, F. C. COOMER, E. MOLINOS, H.-H. KLAUSS, P. T. WOOD, *Angew. Chem.* **118** (2006) 817.
- [152] A. LÄUCHLI, S. WESSEL, M. SIGRIST, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 014401.

LEBENS LAUF

PERSÖNLICHE ANGABEN

Name: Reimar Schmidt
Familienstand: verheiratet
Staatsangehörigkeit: deutsch
Geburtsdatum: 14.03.1975
Geburtsort: Magdeburg

SCHULE & STUDIUM

| | |
|-------------|---|
| 1991 – 1993 | Abitur in Magdeburg Abschlussnote: 1,7 (Gut) |
| 1995 – 2000 | Studium der Physik an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Abschlussnote: 1,2 (Sehr gut) |

BERUFSPRAXIS

| | |
|-------------|---|
| 2000 – 2007 | Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Otto-von-Guericke Universität Magdeburg in der Arbeitsgruppe „Theorie der kondensierten Materie II“, Arbeit als Systemadministrator und in der Softwareentwicklung |
|-------------|---|

AUSLANDSAUFENTHALT

| | |
|-------------|---|
| 1994 – 1995 | ASPECT International Language School, USA (San Francisco und Boston) |
|-------------|---|

WEHRDIENST

| | |
|-------------|---|
| 1993 – 1994 | Grundausbildung in Bischofswiesen, danach Gebirgstragtierkompanie in Bad Reichenhall |
|-------------|---|

Magdeburg, 24. Juni 2008