

**Anwendung der Coupled-Cluster-Methode zur Untersuchung
frustrierter quasi-eindimensionaler und zweidimensionaler
Quantenspinsysteme**

Der Fakultät für Naturwissenschaften
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
zur Erlangung des akademischen Grades

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

am: 19.01.2010

eingereichte Dissertation,

vorgelegt von: Dipl. Phys. R. Zinke

Anwendung der Coupled-Cluster-Methode zur
Untersuchung frustrierter quasi-eindimensionaler
und zweidimensionaler Quantenspinsysteme

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

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

von Diplom-Physiker Ronald Zinke
geboren am 09.01.1977 in Staßfurt

Gutachter: Prof. Dr. Johannes Richter, Magdeburg
Prof. Dr. Jürgen Schnack, Bielefeld

eingereicht am: 19.01.2010
verteidigt am: 29.03.2010

Danksagung

Ich möchte mich bei allen bedanken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. J. Richter für die mir geschenkte Aufmerksamkeit und Unterstützung. Mein Dank gilt insbesondere auch Herrn Dr. J. Schulenburg für die zahlreichen Unterstützungen bei der Weiterentwicklung und Programmierung des CCCM-Programmpaketes sowie für seine Unterstützung beim Rechnen auf den Großrechnern der Universität Magdeburg und auf dem HLRBII. Für die Bereitstellung des CCCM-Programmpaketes und auch für die gemeinsame Zusammenarbeit, möchte ich mich bei Dr. D.J.J. Farnell bedanken. Für die zahlreichen nützlichen Tipps während der Fertigstellung dieser Dissertation, möchte ich mich auch bei der Arbeitsgruppe *Theorie der Kondensierten Materie II* bedanken.

Abschließend gilt mein Dank allen, die mich von der nichtwissenschaftlichen Seite her unterstützt haben: meiner Familie, meinen Freunden, besonders meiner Freundin Janine und meinem Sohn Edgar, welchem ich diese Arbeit widme.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Gegenstand dieser Arbeit	6
2	Die Coupled-Cluster-Methode	9
2.1	Theoretischer Formalismus der CCM	9
2.1.1	CCM für den Grundzustand, Ket- und Bra-Gleichungssysteme	9
2.1.2	Allgemeines Lösungsrezept	13
2.2	CCM und andere Vielteilchen-Methoden	14
2.3	Die Anwendung der CCM auf Spinsysteme	16
2.3.1	Wahl des Modellzustandes und Koordinatentransformation	16
2.3.2	Approximationsschemata	18
2.3.3	Ähnlichkeitstransformation	19
2.3.4	Approximation und Aufstellung des Ket-Gleichungssystems	23
2.3.5	Grundzustandsenergie	27
2.3.6	Aufstellung des Bra-Gleichungssystems	27
2.3.7	CCM für den angeregten Zustand	28
2.3.8	Extrapolation der CCM-Resultate	32
2.3.9	Lösungsrezept für Spinsysteme	34
3	Einfache lineare Kette und einfaches Quadratgitter	36
3.1	Spin- $\frac{1}{2}$ - und Spin-1-HAFM auf der linearen Kette	37
3.2	Spin- $\frac{1}{2}$ - und Spin-1-HAFM auf dem Quadratgitter	41
4	Das quasi-eindimensionale J_1-J_2-Modell	47
4.1	Definition des quasi-1d J_1 - J_2 -Modells	50
4.2	Ket-Gleichungssystem in $SUB2-3$, nichtkollinearer Modellzustand	51
4.2.1	Der klassische Grundzustand	51
4.2.2	Analytische Aufstellung des Ket-Gleichungssystems	52
4.3	Ergebnisse für das frustrierte quasi-1d J_1 - J_2 -Modell in $SUB2-3$	60
4.4	Ergebnisse für das frustrierte quasi-1d J_1 - J_2 -Modell in höheren $LSUBn$	73
5	Untersuchung unfrustrierter und frustrierter Spin-Gitter im Magnetfeld	80
5.1	Unfrustriertes Quadratgitter im Magnetfeld	81
5.2	Frustriertes Dreiecksgitter im Magnetfeld	88

6	Systeme mit Valence-Bond-Grundzuständen	99
6.1	CCM-Formalismus für VB-Zustände am Beispiel des HAFM auf dem 1d- J_1 - J_2 -Modell	100
6.1.1	Anwendung des Formalismus auf das 1d- J_1 - J_2 -Modell	103
6.2	Das Shastry-Sutherland-Modell	109
6.3	Der $J - J'$ -Antiferromagnet auf dem CAVO-Gitter	112
7	Zusammenfassung	117
A	Das numerische CCM-Programmpaket	120
A.1	Allgemeine Informationen und Berechnungsmöglichkeiten	121
A.2	Der Speicherverbrauch und das Skalierungsverhalten bei Multiprozess- sorsystemen	121
A.2.1	Abschätzung der Anzahl fundamentaler Konfigurationen	123
A.2.2	Abschätzung des Speicherbedarfes für die Speicherung der CCM- Gleichungssysteme	125
A.2.3	Lösungsalgorithmen für die CCM-Gleichungssysteme	129
A.2.4	Eine einfache Performance-Untersuchung	130
A.3	Numerische Schwierigkeiten und offene Problemstellungen	133

Kapitel 1

Einleitung

Die Untersuchung von magnetischen Systemen mit stark ausgeprägten Quanteneffekten ist in den vergangenen Jahrzehnten zu einem umfassenden und ausgesprochen reichhaltigen Zweig der modernen Festkörpertheorie geworden, was die überwältigende Zahl an Publikationen experimenteller und theoretischer Studien belegt. Eine detaillierte Referenz über den aktuellen Entwicklungsstand theoretischer Konzepte, über experimentelle Befunde und über methodische Vorgehensweisen findet man z.B. in [1] und den Referenzen darin.

Zu einer zweckmäßigen Beschreibung der grundlegenden Eigenschaften dieser Systeme muss zum einen berücksichtigt werden, dass diese aus sehr vielen (bis zu unendlich vielen) Untereinheiten (Atome, Moleküle, Spins, ...) bestehen und zum anderen, dass diese Untereinheiten miteinander mehr oder weniger stark wechselwirken können. Somit handelt es sich um typische Quanten-Vielteilchen-Systeme, deren Untersuchung in das umfangreiche Gebiet der Quantenstatistik fällt. In vielen theoretischen Untersuchungen zum Festkörpermagnetismus verwendet man für die Modellierung abstrahierte, regelmäßige Gitterstrukturen, die mit lokalisierten Spins als Träger der magnetischen Momente versehen sind. Ein hierbei erfolgreiches und bis heute überwiegend verwendetes Modell zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den lokalisierten Spins ist das Heisenberg-Modell [2], auf dessen Grundlage auch die Untersuchungen in dieser Arbeit erfolgen¹. Die lokalisierten magnetischen Momente (Spins) werden durch vektorartige Operatoren \mathbf{s} gegeben, deren Komponenten der quantenmechanischen Drehimpulsalgebra genügen. Die Wechselwirkung zwischen den Spins wird hierbei durch eine Austauschwechselwirkung J_{ij} vermittelt. Insgesamt lautet der Hamilton-Operator des Heisenberg-Modells:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j. \quad (1.1)$$

Im Rahmen dieser Arbeit gehen die Austauschwechselwirkungen J_{ij} (Betrag und Vorzeichen) als Modellparameter ein. Die Größe des Spins s wird hierbei über $\langle \mathbf{s}_i^2 \rangle = s(s+1)$ festgelegt. In (1.1) ist jede Bindung einfach zu zählen.

Bekanntlich lassen sich aufgrund der hohen Anzahl an Freiheitsgraden für nur wenige Spezialfälle exakte Aussagen treffen², so dass man auf eine geeignete (Quanten)-Viel-

¹Das Heisenberg-Modell, seine Herkunft und viele grundlegende Eigenschaften sind mittlerweile in jedem modernen Buch zur Quantenstatistik zu finden, so dass hier nur eine sehr knappe Darstellung erfolgt. Ein gutes Lehrbuch ist z.B. [3].

²Ein interessanter Spezialfall, auf den in dieser Arbeit häufig Bezug genommen wird, betrifft die exakte Bethe-Lösung der antiferromagnetisch gekoppelten Spins entlang einer Kette [4].

teilchen-Methode zur näherungsweise Beschreibung angewiesen ist. Ganz allgemein soll mittels dieser Methoden das makroskopische Verhalten eines Vielteilchen-Systems auf der Grundlage mikroskopischer Daten (Größe des Spins, Wechselwirkung) bestimmt werden.

Fast alle genauen (numerischen) Methoden bedienen sich mittlerweile speziell entwickelten Programmpaketen, um die bestehenden computertechnischen Möglichkeiten auszunutzen. Auch hier zeigen sich methodenspezifische Vor- und Nachteile. Von einer guten Vielteilchen-Methode erwartet man nunmehr, dass sie möglichst universell anwendbar ist, gute Näherungswerte liefert, eine Fehlerabschätzung ermöglicht und auf systematischen, programmierbaren Algorithmen beruht. Zu den zahlenmäßig wenigen Methoden, die diesen Anforderungen gerecht werden können, zählt die Coupled-Cluster-Methode (CCM). Die CCM selbst sowie auch das für ihre Anwendung vorhandene Programmpaket, sind Hauptgegenstand aller Betrachtungen in dieser Arbeit.

1.1 Gegenstand dieser Arbeit

Die Beschreibung der Coupled-Cluster-Methode erfolgt detailliert im folgenden Kapitel 2. Zunächst wird der allgemeine Formalismus beschrieben, der über die Untersuchung von Spinsystemen hinaus weitreichende Anwendungen in anderen Gebieten, insbesondere in der Quantenchemie, besitzt. Mit dieser Darstellung des Grundgerüsts der CCM erfolgt anschließend ein Vergleich mit alternativen, für Spinsysteme etablierten Vielteilchen-Methoden. Diese Gegenüberstellung motiviert insbesondere die Verwendung der Methode speziell für die Untersuchung von den in dieser Arbeit betrachteten Spinsystemen, was darauffolgend ausführlich beschrieben wird. Ein besonderes Benefit der CCM ist die zugrundeliegende Systematik, die in der praktischen Anwendung eine nahezu vollständige computernumerische Durchführung aller wesentlichen Arbeitsschritte ermöglicht. Nach Vorgabe des Hamilton-Operators wird lediglich ein Modellzustand benötigt, der sukzessive dem exakten Zustand angenähert werden kann. In den vergangenen zehn Jahren wurde so ein nunmehr umfassendes numerisches Programmpaket CCCM (Crystallographic-Coupled-Cluster-Method) [5] entwickelt, mit dem auf einfache Weise auch komplizierte mehrdimensionale Gitter programmiert werden können. Anfänglich war es jedoch nur unter hohem Aufwand möglich, nichtkollineare Modellzustände zu verwenden. Mit wachsendem Interesse wurden jedoch insbesondere frustrierte Spinsysteme untersucht, welche einen Phasenübergang von kollinearen (kommensurablen) zu nichtkollinearen (kommensurablen oder inkommensurablen) Spin-Spin-Korrelationen aufweisen können. Es bestand zunächst die Aufgabe zu sondieren, inwiefern nichtkollineare Modellzustände in das Programm integriert werden können, um diesbezüglich zu einer Optimierung des Programms beizutragen. Die Aufgabe bestand auch in einer systematischen Verwendung, Modifikation und Unterstützung bei der Weiterentwicklung des Programmpaketes zur Schaffung eines getesteten und zuverlässigen numerischen CCCM-Programms³.

Zur Demonstration der Fähigkeiten des Programms (und der CCM als Methode) werden im Kapitel 3 zunächst vier einfache Heisenberg-Antiferromagnete (HAFM) betrachtet: die einfache lineare Kette und das einfache isotrope Quadratgitter unter Verwendung des Néel-Zustandes als CCM-Modellzustand. Der Quantenspin s kann hierbei

³Informationen zum Programm, den Haupt-Programmierern und zum Umfang sind im Anhang A angegeben.

die Werte $s = \frac{1}{2}$ oder $s = 1$ annehmen. Ziel dieses Kapitels ist es, für diese Standardmodelle *State-of-the-Art-CCM*-Ergebnisse zu präsentieren. Diese Ergebnisse lassen sich mit bekannten (für die $s = \frac{1}{2}$ -Kette sogar exakten) Aussagen vergleichen und geben somit Auskunft über die Güte der CCM (zusammen mit einem konkreten Modellzustand⁴).

In Kapitel 4 wird dann ein quasi-eindimensionales Quantenspinsystem aus gekoppelten J_1 - J_2 -Ketten mit dem Novum eines nichtkollinearen, spiralartigen Modellzustandes detailliert untersucht. Dieses Modell ist je nach Parameterwahl frustriert und besitzt zahlreiche interessante Spezialfälle, die aus unterschiedlichen Fragestellungen heraus untersucht wurden. Man entnehme deshalb die Details zur Motivation der entsprechenden Einleitung zu diesem Kapitel. Begonnen werden die dortigen Untersuchungen mit einer aufwändigen analytischen Beispielrechnung unter Verwendung eines Spiralzustandes als Modellzustand. Für diese Beispielrechnung wurden J_1 - J_2 -Ketten mittels einer Zwischenkettenkopplung zu einem zweidimensionalen Gitter gekoppelt und eine niedrige Näherungsstufe gewählt. Hierbei werden alle wesentlichen Arbeitsschritte der CCM zur Bestimmung des Grundgleichungssystems (Ket-Gleichungssystem) vorgeführt. Der Spiralwinkel (Winkeldifferenz zwischen zwei benachbarten Spins) wird hierbei als freier Parameter betrachtet und durch Minimierung der Grundzustandsenergie bestimmt. Darauffolgend wird das Modell numerisch ausgewertet. Im Vordergrund steht die Frage, wie die Zwischenkettenkopplung und Quantenfluktuationen das klassische Verhalten (Spiralwinkel, Phasenübergangspunkte) des Systems beeinflussen, da eine solche Beeinflussung im klassischen System nicht gefunden wird. Zudem wurde dies bisher nicht mit einer alternativen Methode untersucht.

In den folgenden Abschnitten wird das Übergangsverhalten von einem ungeordneten eindimensionalen Grundzustand zu einem geordneten zweidimensionalen Grundzustand an zwei unfrustrierten Gittern untersucht. Beide Modellgitter unterscheiden sich hierbei in der Größe des Quantenspins s und sind Spezialfälle ($J_2 = 0$) des zuvor betrachteten Modells. Insbesondere soll der vermutete Unterschied zwischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen und Spin-1-Systemen in Bezug auf die Frage nach der Existenz einer ungeordneten Phase diskutiert werden. Die Ergebnisse früherer numerischer Untersuchungen sind z.T. uneindeutig, stützen aber insgesamt die Vermutung, dass es im Spin- $\frac{1}{2}$ -System keine ungeordnete Phase für eine endliche Zwischenkettenkopplung gibt, wohl aber im Spin-1-System, was mit der Existenz eines Spingaps für das eindimensionale Modell im Zusammenhang steht. Dies soll im Rahmen der CCM bestätigt werden.

Bei Hinzunahme einer frustrierenden Wechselwirkung zu den übernächsten Nachbarn im hier betrachteten quasi-eindimensionalen Spin- $\frac{1}{2}$ -System, erwartet man für stärkere Frustrationen ebenfalls die Notwendigkeit einer endlichen Zwischenkettenkopplung für einen ferngeordneten Grundzustand, was erneut mit dem, durch die hinzukommende Frustration, entstehenden Spingaps in Zusammenhang gebracht werden kann. Auch diese Problemstellung soll mittels der CCM untersucht werden.

Im Kapitel 5 werden, ebenfalls auf der Grundlage nichtkollinearer Modellzustände, zwei Spingitter (unfrustriertes Quadratgitter, frustriertes Dreiecksgitter) in einem Magnetfeld mittels der CCM untersucht. Hier wird ein wesentlicher Beitrag der CCM besonders für das frustrierte Dreiecksgitter zu erwarten sein, da bei diesen Systemen alternative

⁴Hier soll angemerkt werden, dass die Wahl eines geeigneten Modellzustandes ein durchaus kritischer Arbeitsschritt bei der Anwendung der CCM ist. Darauf wird im Abschnitt 2.3.1 besonders eingegangen, da Konvergenzprobleme oder unphysikalische Ergebnisse auch hier ihre Ursachen haben können.

Methoden Limitierungen aufweisen. Die vorhandenen Literaturdaten zu diesen Systemen sollen durch Hinzufügen von CCM-Daten, aus Berechnungen bis hin zu hohen Näherungsstufen, erweitert werden.

Im Kapitel 6 wird demonstriert, dass mit dem vorliegenden numerischen Programmpaket dimer- und plakettenartige Valence-Bond-Grundzustände unter Verwendung von Produktmodellzuständen unabhängiger Einzelspin-Operatoren beschrieben werden können. Dadurch erweitert sich erneut die Anwendbarkeit des vorliegenden Programmpaketes.

Hierzu werden bereits bekannte und gut untersuchte Modelle wie die J_1 - J_2 -Kette, das Shastry-Sutherland-Modell und das CAVO-Modell erneut betrachtet. Diese Modelle haben die Gemeinsamkeit, dass sie jeweils in verschiedenen Regionen der Modellparameter lokalisierte Dimere oder Plaketten als exakte Quantengrundzustände ausbilden. Es wird in diesem Kapitel demonstriert, dass exakte lokale Singulett-Grundzustände gefunden werden können und die CCM eine gute Methode zum Studium von Valence-Bond-Grundzuständen ist. So werden gute Ergebnisse für die Grundzustandsenergie und für die Magnetisierung innerhalb der dimerisierten oder plakettenartigen Valence-Bond-Phasen gefunden.

Kapitel 7 fasst schlussendlich die wesentlichen Resultate zu den in dieser Dissertation untersuchten Systemen zusammen.

Kapitel 2

Die Coupled-Cluster-Methode

In diesem Kapitel wird die Coupled-Cluster-Methode (CCM) zunächst kurz allgemein (Abschnitt 2.1) und dann speziell zugeschnitten für Quantenspinsysteme (Abschnitt 2.3) beschrieben. Am Ende beider Abschnitte wird ein Lösungsrezept mit den entsprechend durchzuführenden Arbeitsschritten angegeben. Durch einen kurzen Vergleich (Abschnitt 2.2) mit anderen verfügbaren Vielteilchen-Methoden, sollen die Vor- und Nachteile der CCM bei der Berechnung von Erwartungswerten an Spinsystemen analysiert werden.

2.1 Theoretischer Formalismus der CCM

Die Verwendung des CCM-typischen exponentiellen Ansatzes zur Störungsrechnung bei kernphysikalischen Problemen um 1960 von F. Coester und H. Kümmel [6, 7] wird als die Geburtszeit der CCM angegeben [8]. In der darauffolgenden Zeit wurden Anwendungsmöglichkeiten der CCM auf zahlreiche weitere physikalische und chemische Systeme geschaffen. Die Grundstruktur, welche im Folgenden beschrieben wird, wurde auch zu Gunsten der Universalität der Methode modifiziert. Eine umfangreiche Übersicht hierzu gibt [8] und ebenso die darin enthaltenen Referenzen. Erste Anwendungen der CCM auf Quantenspinsysteme wurden um 1990 von M. Roger und J.H. Hetherington [9] zur Grundzustandsberechnung von einem zweidimensionalen Heisenbergmodell auf einem Quadratgitter durchgeführt. Weitere Details zur Anwendung der CCM auf Quantenspinsysteme und die dazugehörigen Referenzen werden im Abschnitt 2.3 angegeben.

Die nun folgende Beschreibung der CCM eignet sich für die Berechnung von Grundzustandserwartungswerten von Quanten-Vielteilchen-Systemen.

2.1.1 CCM für den Grundzustand, Ket- und Bra-Gleichungssysteme

Zu Beginn der Anwendung der CCM wählt man einen Modellzustand $|\Phi\rangle$ aus. Zu diesem Modellzustand definiert man eine Menge von Erzeugungs- (C_L^+) und dazu adjungierten Vernichtungsoperatoren (C_L). Für diese Operatoren gelten folgende Eigenschaften:

$$\langle\Phi|C_L^+ = C_L|\Phi\rangle = 0 \quad \forall L \neq 0, \quad C_0^+ \equiv 1 \quad (2.1)$$

$$[C_L^+, C_J^+]_- = 0 = [C_L, C_J]_- \quad (2.2)$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren können z.B. Produkte von Einteilchen-Operatoren sein. Der Index L ist ein Vielteilchen-Index und kennzeichnet mehrere Einteilchen-Indizes gleichzeitig. Für die Mengen $\{|\Phi\rangle, C_L^+\}$ gelten weiterhin:

$$\langle\Phi|C_L C_J^+|\Phi\rangle = \delta_{LJ} \quad (\text{Orthonormalität}) \quad (2.3)$$

$$\sum_L C_L^+|\Phi\rangle\langle\Phi|C_L = 1 = |\Phi\rangle\langle\Phi| + \sum_{L\neq 0} C_L^+|\Phi\rangle\langle\Phi|C_L \quad (\text{Vollständigkeit}). \quad (2.4)$$

In Bezug zu den Operatoren C_L^+ handelt es sich beim Modellzustand $|\Phi\rangle$ um einen verallgemeinerten Vakuumzustand, aus dem sich durch Anwendung der C_L^+ jeder Zustand des Systems darstellen lässt. Der Modellzustand stellt auch eine Näherung für den Grundzustand des zu beschreibenden Systems dar und sollte mit dem exakten Grundzustand überlappen. Man kann z.B. oft den klassischen Grundzustand oder einen aus ihm abgeleiteten Zustand auswählen. An dieser Stelle ist nicht sofort einzusehen, dass passende Modellzustände, verknüpft mit solchen Operatoren, auch immer existieren. Bei der Untersuchung verschiedener Vielteilchen-Systeme hat sich gezeigt, dass das Auffinden solcher Modellzustände und Multikonfigurations-Operatoren $\{|\Phi\rangle, C_L^+\}$ im Allgemeinen möglich ist [8].

Mit einer geeigneten Menge $\{|\Phi\rangle, C_L^+\}$ kann man folgende Ansätze für den exakten Ket- und Bra-Zustand machen:

$$|\Psi\rangle = e^S|\Phi\rangle, \quad S = \sum_{L\neq 0} a_L C_L^+ \quad (\text{Ansatz für Ket-Grundzustand}) \quad (2.5)$$

$$\langle\tilde{\Psi}| = \langle\Phi|\tilde{S}e^{-S}, \quad \tilde{S} = 1 + \sum_{L\neq 0} \tilde{a}_L C_L \quad (\text{Ansatz für Bra-Grundzustand}). \quad (2.6)$$

Die Operatoren S und \tilde{S} nennt man Korrelationsoperatoren für den Ket- bzw. Bra-Zustand, die Größen $\{a_L\}$ und $\{\tilde{a}_L\}$ entsprechend Korrelationskoeffizienten. Die Summen werden über alle möglichen Konfigurationen des Systems gebildet. Des Weiteren sind die folgenden Normierungsbedingungen erfüllt:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Phi\rangle = 1. \quad (2.7)$$

Setzt man den CCM-Ansatz für den Ket-Zustand (2.5) in die stationäre Schrödinger-Gleichung $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ (H ist der Hamilton-Operator des Systems) ein, so folgt:

$$(e^{-S} H e^S - E)|\Phi\rangle = 0. \quad (2.8)$$

Damit ist die Grundzustandsenergie des Systems nur von den Ket-Korrelationskoeffizienten $\{a_L\}$ abhängig:

$$E = \langle\Phi|e^{-S} H e^S|\Phi\rangle = \langle\Phi|H e^S|\Phi\rangle = E(\{a_L\}). \quad (2.9)$$

Die in (2.9) auftretende Ähnlichkeitstransformation ist in der CCM von zentraler Bedeutung. Sie kann für jeden quantenmechanischen Operator in einer Reihe von Kommutatoren dargestellt werden:

$$e^{-S} H e^S = H + [H, S]_- + \frac{1}{2}[[H, S]_- S]_- + \dots \quad (2.10)$$

Die Summe bricht nach einigen Termen exakt ab, falls H nur Produkte mit einer endlichen Anzahl von Einteilchen-Operatoren enthält. Die Ähnlichkeitstransformation kann also exakt berechnet werden. Bildet man das Skalarprodukt von $\langle \Phi | C_L$ mit (2.8) und beachtet die Eigenschaft (2.1) der C_L , so erhält man ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem für die Ket-Korrelationskoeffizienten $\{a_L\}$:

$$\langle \Phi | C_L e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = 0, \quad \forall L \neq 0. \quad (2.11)$$

Um die Bra-Korrelationskoeffizienten zu bestimmen, formt man die Schrödinger-Gleichung $\langle \tilde{\Psi} | H = E \langle \tilde{\Psi} |$ zunächst mit (2.6) um zu $\langle \Phi | \tilde{S} (e^{-S} H e^S - E) = 0$. Das Skalarprodukt mit den Zuständen $C_L^+ | \Phi \rangle$ liefert die Gleichung:

$$\langle \Phi | \tilde{S} (e^{-S} H e^S - E) C_L^+ | \Phi \rangle = 0, \quad \forall L \neq 0. \quad (2.12)$$

Bildet man nun das Skalarprodukt von $\langle \Phi | \tilde{S} C_L^+$ mit (2.8) und berücksichtigt die Kommutatoren (2.2), so folgt mit (2.12):

$$\langle \Phi | \tilde{S} e^{-S} [H, C_L^+] e^S | \Phi \rangle = 0, \quad \forall L \neq 0. \quad (2.13)$$

Dieses als Bra-Gleichungssystem bezeichnete Gleichungssystem (2.13) stellt im Allgemeinen ein lineares, von den $\{a_L\}$ abhängiges Gleichungssystem zur Bestimmung der $\{\tilde{a}_L\}$ dar. Mit (2.11) und (2.13) erhält man die $\{a_L\}$ und $\{\tilde{a}_L\}$ als vollständigen Satz unabhängiger Variablen, mit denen der Grundzustand vollständig bestimmt ist.

Der Erwartungswert einer beliebigen, am System messbaren Größe ist:

$$\bar{A} = \langle \tilde{\Psi} | A | \Psi \rangle = \bar{A}(\{a_L, \tilde{a}_L\}). \quad (2.14)$$

In dieser Arbeit wird als Erwartungswert insbesondere der Ordnungsparameter (Magnetisierung) interessant sein, der innerhalb der CCM berechnet wird durch:

$$M = -\frac{1}{N} \langle \tilde{\Psi} | \sum_{i=1}^N \hat{s}_i^z | \Psi \rangle. \quad (2.15)$$

Alle bis zu diesem Punkt getroffenen Betrachtungen sind exakt. In der CCM kommt eine Näherung dadurch zustande, dass die in den Summen für die Korrelationsoperatoren (2.5) und (2.6) zu berücksichtigenden Konfigurationen auf eine bestimmte Auswahl begrenzt werden. Hierzu stehen Näherungsschemata zur Verfügung, welche zum einen gut physikalisch begründbar sind und zum anderen eine systematische Verbesserung erlauben. Eine Beschreibung geeigneter Näherungsschemata für Spinsysteme erfolgt im Abschnitt 2.3.2.

Abschließende Bemerkungen:

Die Koeffizienten $\{a_L\}$ und $\{\tilde{a}_L\}$ kann man alternativ auch aus der Forderung erhalten, dass der Erwartungswert des Hamilton-Operators $\bar{H} = \langle \tilde{\Psi} | H | \Psi \rangle$ in Bezug auf die unabhängigen Variablen $\{a_L\}$ und $\{\tilde{a}_L\}$ stationär wird. Mit den Bedingungen $\partial \bar{H} / \partial \tilde{a}_L = 0$ und $\partial \bar{H} / \partial a_L = 0$ folgen dann ebenfalls die Gleichungen (2.11) und (2.13). Da die Korrelationskoeffizienten $\{a_L\}$ und $\{\tilde{a}_L\}$, die den Grundzustand vollständig festlegen, auf diese Weise auch durch ein variationelles Prinzip bestimmt werden können, nennt man die Methode manchmal bivariationell [8]. Dennoch ist festzuhalten, dass die in (2.5) und (2.6) definierten Ket- und Bra-Zustände zueinander nicht adjungiert sind, weswegen dieser Ansatz für die CCM zu keiner variationellen Methode führt.

Auch enthalten die Ausdrücke für die Erwartungswerte im Allgemeinen die $\{a_L, \tilde{a}_L\}$ in endlicher Ordnung und es ist keine weitere Näherung notwendig, nachdem S selbst bereits genähert wurde¹. Mit der Definition von S und dem exponentiellen Ansatz kann man beweisen, dass das Goldstone-Linked-Cluster-Theorem erfüllt ist (selbst bei beliebiger Näherung von S). Der Beweis nutzt die Ähnlichkeitstransformation (2.10) und die Eigenschaft, dass alle Komponenten von S konstruktionsbedingt miteinander kommutieren und wird in [8] vorgeführt. Die daraus resultierenden Vorteile des hier verwendeten CCM-Ansatzes sind das richtige Skalieren extensiver Größen im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$), selbst bei einer Näherung des Korrelationsoperators S^2 .

Eine weitere wichtige Eigenschaft ist, dass in jeder Näherung von S das Hellmann-Feynman-Theorem erfüllt ist³.

Den hier angegebenen Ansatz bezeichnet man auch als die *normale* CCM (NCCM) [8]. Es gibt auch *erweiterte* CCM (ECCM)-Formulierungen, wo auch der Bra-Grundzustand durch einen exponentiellen Ansatz dargestellt wird [10]:

$$\langle \tilde{\Phi} | = \langle \Psi | e^{\tilde{S}} e^{-S}. \quad (2.16)$$

Die Vorgehensweise bei der Anwendung der ECCM ist der hier vorgestellten sehr ähnlich. Die Gleichungen der NCCM können in jeder Näherungsstufe aus den Gleichungen der ECCM gewonnen werden. Anwendungen der ECCM [11] auf antiferromagnetische Spinketten lassen im Vergleich zur exakten Bethe-Lösung erkennen, dass die Resultate der ECCM innerhalb der gleichen Näherungsstufe besser als die der NCCM sind⁴. Allerdings sind die ECCM-Gleichungssysteme auch deutlich komplizierter. Insgesamt zeigt sich [11], dass die ECCM besser als die NCCM geeignet ist, globale Systemeigenschaften wie Quantenphasenübergänge zu beschreiben. Auch in der ECCM sind Ket- und Bra-Zustände zueinander nicht adjungiert, weswegen dieser Ansatz ebenfalls zu keiner variationellen Methode führt⁵. Als letzte Bemerkung sei hier angegeben, dass es

¹Hätte man z.B. E variationell formuliert durch:

$$E = \frac{\langle \Phi | e^{S^+} H e^S | \Phi \rangle}{\langle \Phi | e^{S^+} e^S | \Phi \rangle},$$

so wäre dieser Ausdruck im Allgemeinen von unbeschränkter Ordnung in S und \tilde{S} , unabhängig von einer Näherung in S . Dieser Ausdruck ließe sich also im Gegensatz zur nicht-variationellen Formulierung der CCM entsprechend (2.9) nicht exakt berechnen.

²Bei der *Linked-Cluster-Entwicklung* im Rahmen der Störreihenentwicklung von Wellenfunktionen werden zur Bearbeitung auch diagrammatische Techniken (Goldstone-Diagramme) verwendet. Die Gültigkeit des Theorems schließt bestimmte Diagrammtypen (*unlinked Diagramme*) aus und das Skalierungsverhalten wird letztendlich durch die *linked Diagramme* bestimmt, welche die korrekte Extensivität entsprechender Systemgrößen im thermodynamischen Limes sicherstellen. Genaueres hierzu entnehme man der Spezialliteratur.

³ $|\Psi(\lambda)\rangle$ sei ein normierter Eigenvektor von $H(\lambda)$ zum Eigenwert $E(\lambda)$. Das Hellmann-Feynman-Theorem besagt:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left\langle \Psi(\lambda) \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \Psi(\lambda) \right\rangle.$$

⁴Hier soll angemerkt werden, dass in dieser Arbeit nur die Resultate in niedrigsten Näherungsstufen verglichen werden konnten. Da es bislang für die ECCM im Gegensatz zur NCCM kein ausgereiftes numerisches Programmpaket gibt, mit denen Untersuchungen bis zu hohen Näherungsstufen durchgeführt werden können, relativiert sich dieser Vorteil.

⁵ $|\Psi_n\rangle$ bezeichne die normierten Eigenfunktionen von H zum Eigenwert $E_n \geq E_0$ mit E_0 als Grundzustandsenergie. Mit den Entwicklungen des Ket- und des Bra-Zustandes der *normalen* und *erweiter-*

auch variationelle Ansätze für die CCM gibt [12, 13, 14], bei welcher der Ket- und der Bra-Zustand zueinander adjungiert sind:

$$|\Psi\rangle = e^S|\Phi\rangle, \quad S = \sum_L F_L C_L^+ \quad (2.17)$$

$$\langle\tilde{\Psi}| = \langle\Phi|e^{\tilde{S}}, \quad \tilde{S} = \sum_L \tilde{F}_L C_L. \quad (2.18)$$

War zunächst eine einfache variationelle Rechnung mit diesem Ansatz nicht möglich, so gibt es mittlerweile vielversprechende Lösungsansätze unter Mitberechnung von Störungsfunktionen, welche algebraisch [13] oder diagrammatisch [14] bestimmt werden können. Sinn der Erweiterungen der CCM sind die Ausweitung der Anwendbarkeit der Methode und die Verbesserung der Genauigkeit bei konkreten Berechnungen, z.B. bei stark korrelierten Systemen und Systemen mit Phasenübergängen. In dieser Arbeit wird ausschließlich die NCCM (in folgenden Kapiteln nur noch CCM genannt) verwendet, da in allen CCM-Versionen sehr hohe Genauigkeiten nur durch die Berechnung hoher Näherungsstufen (und anschließender Extrapolation) erzielt werden⁶. Hierzu wird die Verwendung von leistungsfähigen Computeralgorithmen zwingend erforderlich, welche gegenwärtig für die Berechnungen an Quantenspinsystemen nur für die NCCM vorliegen und auch im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelt wurden.

2.1.2 Allgemeines Lösungsrezept

Dieser Abschnitt beinhaltet eine zusammengefasste Darstellung der durchzuführenden Einzelschritte. Er stellt gewissermaßen ein Lösungsrezept für CCM-Rechnungen dar.

1. Wahl eines geeigneten Modellzustandes mit einem dazugehörigen Satz von Operatoren $\{|\Phi\rangle, C_L^+\}$.
2. Wahl einer geeigneten Näherung für den Korrelationsoperator S .
3. Aufstellen des Ket-Gleichungssystems (2.11).
4. Lösen des Ket-Gleichungssystems (2.11); man erhält daraus die Ket-Korrelationskoeffizienten, kann damit den Ket-Grundzustand (2.5) aufstellen und die Grundzustandsenergie (2.9) berechnen.

ten CCM folgt:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n\rangle, \quad |\tilde{\Psi}\rangle = \sum_n \tilde{a}_n |\Psi_n\rangle \Rightarrow \langle\tilde{\Psi}_n|H|\Psi_n\rangle = \sum_n \tilde{a}_n^* a_n E_n.$$

Da nur die Normierung $\langle\tilde{\Psi}|\Psi\rangle = \sum_n \tilde{a}_n^* a_n = 1$ bekannt ist, kann man $\langle\tilde{\Psi}_n|H|\Psi_n\rangle$ nicht weiter abschätzen. Wären der Bra- und Ket-Zustand zueinander adjungiert, so wäre die Angabe einer oberen Grenze für die Grundzustandsenergie dagegen möglich:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle \Rightarrow \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |a_n|^2.$$

Bei der Auswahl der Lösungen der Gleichungssysteme ist dies zu beachten, allerdings erwies sich die Nicht-Variationalität der CCM in dieser Arbeit als unproblematisch.

⁶Nur die Grundzustandsenergie und unmittelbar aus dieser abgeleitete Größen sind schon in niedrigen Näherungsstufen sehr genau.

5. Aufstellen und Lösen des Bra-Gleichungssystems (2.13); man erhält die Bra-Korrelationskoeffizienten, kann damit den Bra-Grundzustand (2.6) aufstellen und zusammen mit den Ergebnissen aus Punkt 4 beliebige Erwartungswerte nach (2.14) bzw. die Magnetisierung nach (2.15) berechnen.

Der aufwändigste Teil der Methode ist das Aufstellen und Lösen der Gleichungssysteme. Letzteres sollte wegen der für höhere Näherungsstufen auftretenden großen Anzahl von Gleichungen computergestützt durchgeführt werden. Das angegebene Konzept ist sehr allgemein. Im folgenden Abschnitt wird die CCM auf Spinsysteme zugeschnitten. Dieser Abschnitt wird dann ebenfalls mit einem Lösungsrezept enden - speziell für Spinsysteme.

2.2 CCM und andere Vielteilchen-Methoden

Viele typische physikalische Systeme bestehen aus einer großen Zahl (wechselwirkender) Mikroteilchen und sind somit Gegenstand der Betrachtung in der Vielteilchen-Physik. Grundlegende Probleme bei der Bearbeitung dieser Systeme bereitet oft nicht die Anzahl der Mikroteilchen, sondern die Berücksichtigung der Wechselwirkung. Bis auf wenige Ausnahmen können Vielteilchen-Probleme nur approximativ durch Verwendung eines zur Beschreibung geeigneten Modells und einer geeigneten Näherungsmethode physikalisch vernünftig gelöst werden.

Wichtige Qualitätsmerkmale einer solchen (Quanten)-Vielteilchen-Methode im Allgemeinen sind hierbei:

- mikroskopische (nichtphänomenologische) Grundlagen,
- universelle Anwendbarkeit auf zahlreiche physikalische Vielteilchen-Probleme,
- Approximation, die systematisch verbessert werden kann,
- sehr hohe Genauigkeit in praktischen Anwendungen.

Wie in [8] detailliert untersucht wird, gibt es neben der CCM eine überschaubare Anzahl weiterer Methoden, die diese Anforderungen (oder zumindest einen Teil) im Allgemeinen erfüllen können. Dort werden auch Verwandtschaften der CCM mit anderen Vielteilchen-Methoden untersucht, sowie ein allgemeiner Vergleich mit diesen durchgeführt. Untersuchungen zur Genauigkeit der CCM an einem konkreten physikalischen Modell (J - J' -Modell) im Vergleich zu etablierten Vielteilchen-Methoden für den Grundzustand und für erste Anregungen von Quantenspinsystemen sind Gegenstand ausführlicher Betrachtungen in [15]. Die dort zum Vergleich herangezogenen Methoden waren die Spinwellentheorie (SWT), die exakte Diagonalisierung (ED) und variationelle Methoden (VM). In [15] werden die gefundenen Ergebnisse darüber hinaus zusätzlich noch mit Resultaten der Quanten-Monte-Carlo-Methode (QMC) und der Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Theorie (DMRG) verglichen.

Hauptgegenstand dieser Arbeit sind quasi-eindimensionale und zweidimensionale Spinsysteme, welche strukturbedingt oder bei bestimmten Parameterwerten zudem noch stark frustriert⁷ sind. Die theoretische Beschreibung solcher Systeme ist nicht unproble-

⁷Ein Spinsystem ist frustriert, wenn sich nicht alle Spinausrichtungen im Sinne der ferromagnetischen Wechselwirkung parallel oder im Sinne der antiferromagnetischen Bindung antiparallel einstellen

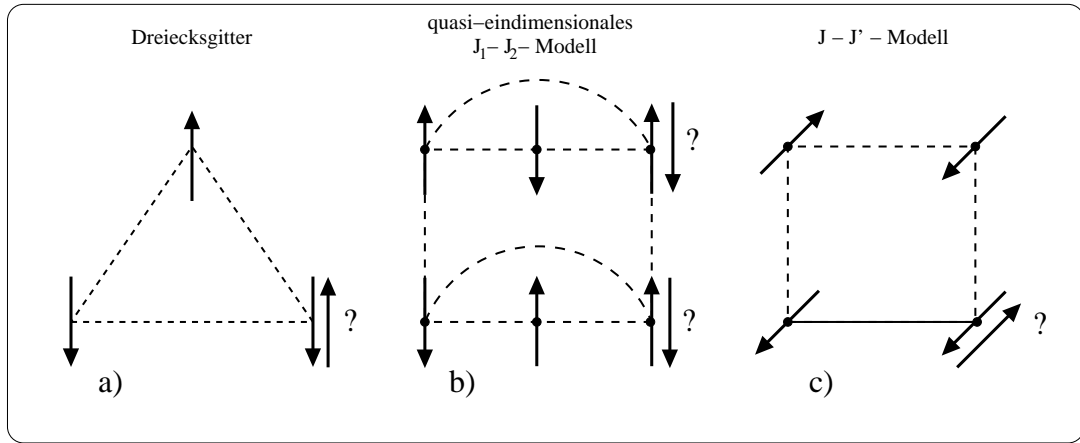


Abbildung 2.1: Frustration bei antiferromagnetischer Wechselwirkung (gestrichelte Linien) verursacht durch die Gitterstruktur a); Frustration verursacht durch Konkurrenz von Bindungen b) und c) (durchgezogene Linie entspricht ferromagnetischer Wechselwirkung). Das Fragezeichen illustriert das Unvermögen der Spins, einen entsprechend der Wechselwirkungen eindeutigen energetisch optimierten Zustand einzunehmen.

matisch, da sich Schwachstellen alternativer Methoden zeigten oder die methodenspezifischen Limitierungen relevant wurden. Wegen der endlichen Zwischenkettenkopplung in den untersuchten frustrierten Systemen (vgl. Kap. 4) würden sich ED-Rechnungen nur für kleine Systeme durchführen lassen. Zusätzlich wird die Anwendung der ED durch die mögliche nichtkollineare Ordnung in frustrierten Systemen wegen stärkerer *finite-size*-Effekte erschwert. DMRG-Techniken scheiden gegenwärtig wegen ihrer Beschränkung auf eindimensionale Systeme für einige Parameterwerte sogar aus. Die QMC leidet bei diesen Systemen unter dem berühmten "Vorzeichenproblem", was die Anwendung sehr erschwert und die Genauigkeit erheblich beeinträchtigt⁸.

Die CCM andererseits unterliegt diesen Einschränkungen *a priori* nicht. Prinzipiell lassen sich frustrierte Systeme in beliebigen Dimensionen auch mit inkommensurabler

lassen (vgl. Abbildung 2.1). Ursachen hierfür können die Gitterstruktur selbst (z.B. Antiferromagnet auf einem Dreiecksgitter) oder konkurrierende Wechselwirkungen auf einem Gitter (z.B. J - J' -Modell) sein. In klassischen Systemen führt Frustration oft zu Phasenübergängen von kollinear zu komplizierter, nichtkollinear Ordnung, während sich in den entsprechenden Quantensystemen sowohl die Ordnung des Phasenübergangs als auch der Phasenübergangspunkt verändern kann (siehe Kap.4).

⁸Im Prinzip versucht man den Grundzustand $|\Psi\rangle$ des Systems, gegeben durch den Hamilton-Operator H , durch Anwendung von geeigneten Projektionsoperatoren $P = P(H)$ aus einem Testzustand $|\Phi\rangle$ zu gewinnen. Mathematisch entspricht dies einer Pfadintegration über Vielteilchen-Trajektorien im Konfigurationsraum, welche durch zufällige Bewegungen ("random walks") einer Menge unabhängiger Wanderer numerisch simuliert wird. Die Genauigkeit dieser Vorgehensweise, beschränkt durch statistische Fehler, lässt sich beliebig verbessern, vorausgesetzt die Simulation läuft ausreichend lange. Eine für die Methode relevante Größe ist $w(a,b) = \langle a|P|b\rangle \frac{\Phi(b)}{\Phi(a)}$, wobei $|a\rangle$ und $|b\rangle$ Konfigurationsvektoren sind. $w(a,b)$ wird als Wahrscheinlichkeit interpretiert, mit der ein Wanderer von der Konfiguration $|a\rangle$ zur Konfiguration $|b\rangle$ wandert, weswegen diese Größe positiv definit sein sollte. Für bipartite Gitter wird dies durch das *Marshall-Peierls-Sign-Rule* [16] sichergestellt. Bei frustrierten Gittern gibt es keine entsprechende Aussage bzw. das Theorem gilt explizit nicht. In entsprechenden Simulationen zeigen sich numerische Instabilitäten bzw. die Anwendbarkeit der Methode selbst ist sehr eingeschränkt. Ein Verfahren, dieses Problem zu umgehen, ist die *Fixed-node Green-function Monte Carlo Method* [17], welche jedoch, was die Genauigkeit betrifft, anderen Standardmethoden deutlich unterlegen ist [18].

magnetischer Struktur untersuchen. Die CCM ist demnach prädestiniert für die Untersuchung dieser, für andere Methoden schwierig zu behandelnder Systeme. Darüber hinaus zeigten die Vergleichsuntersuchungen in [15], dass die Genauigkeiten der Ergebnisse der CCM mit den genauesten Ergebnissen etablierter Methoden vergleichbar oder besser sind, was eine vielversprechende Ausgangssituation für die Untersuchung der für diese Arbeit relevanten Spinsysteme darstellt.

2.3 Die Anwendung der CCM auf Spinsysteme

In diesem Kapitel wird beschrieben, wie man die Coupled-Cluster-Methode speziell auf Quantenspinsysteme anwendet. Die einzelnen Arbeitsschritte werden zunächst für die allgemeine Spinquantenzahl s angegeben. An vielen Stellen werden jedoch wichtige Gleichungen für den Spezialfall $s = \frac{1}{2}$ hervorgehoben, weil in folgenden Kapiteln z.T. ausführliche Beispielrechnungen für $s = \frac{1}{2}$ -Systeme durchgeführt werden.

2.3.1 Wahl des Modellzustandes und Koordinatentransformation

Zu Beginn der Coupled-Cluster-Rechnungen wählt man einen Modellzustand aus. Die Wahl sollte physikalisch begründet sein. Man kann (wie in Kap 2.1 angedeutet) z.B. den klassischen Grundzustand auswählen oder einen aus ihm abgeleiteten Zustand. Für eine exakte Berechnung wäre es notwendig, dass der Modellzustand einen endlichen Überlapp mit dem exakten Grundzustand aufweist, also zu ihm nicht orthogonal ist. Allerdings dürfte der Korrelationsoperator S dann auch nicht genähert werden. Bei Verwendung eines Näherungsschemas ist ein endlicher Überlapp zunächst nicht zwingend erforderlich. Es zeigt sich, dass bei zu schlechter Wahl des Modellzustandes bzw. bei Phasenübergängen die Iterationsverfahren zum Auffinden der Lösung der auftretenden Gleichungssysteme nicht oder gegen unphysikalische Werte konvergieren. In diesem Sinne sollte der Modellzustand nicht zu schlecht sein [15]. In solchen Modellzuständen weisen die Spins im Allgemeinen nicht in dieselbe Richtung:

- Néel-Zustand: $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\dots\rangle$
- Spiral-Zustände: $|\uparrow\nearrow\rightarrow\searrow\downarrow\swarrow\dots\rangle$.

Um alle Spins an allen Gitterplätzen gleichwertig behandeln zu können, nimmt man eine lokale Koordinatentransformation so vor, dass im gedrehten System die Spins alle in negative z-Richtung weisen. Man kann dadurch für alle Modellzustände dieselben Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren verwenden und hat somit eine einheitliche Vorgehensweise, was konkrete Berechnungen erheblich vereinfacht. Damit kann man den CCM-Modellzustand mit den dazugehörigen verallgemeinerten Operatoren wie folgt darstellen:

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\downarrow\rangle_i, \quad C_L^+ = s_r^+, s_r^+ s_l^+, s_r^+ s_l^+ s_m^+, \dots \quad (2.19)$$

wobei gilt: $|\downarrow\rangle_i \equiv |s, -s\rangle_i$ (s = Spinquantenzahl) und r, l und m bezeichnen beliebige Gitterplätze. Man erreicht dies, indem man das verwendete Koordinatensystem für

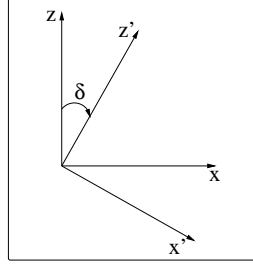


Abbildung 2.2: Veranschaulichung der Rotation um einen Winkel δ

jeden Spin lokal nach Notwendigkeit dreht (siehe Abb. 2.2). Die allgemeinen Transformationsgleichungen für eine Drehung um die y -Achse (für planare Modellzustände) lauten:

$$\begin{aligned}
s_i^x &= \cos \delta_i s_i'^x + \sin \delta_i s_i'^z \\
s_i^y &= s_i'^y \\
s_i^z &= -\sin \delta_i s_i'^x + \cos \delta_i s_i'^z.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Die Rotation des lokalen Koordinatensystems nach den Gleichungen (2.20) führt dazu, dass die Spins in den neuen Koordinaten (mit Akzent) in negative z -Richtung weisen. Der Index i kennzeichnet die Drehung des i -ten Spins. Wählt man z.B. als Modellzustand den Néel-Zustand (z.B. Abschnitt 4.4), so kann man für die Transformationsgleichungen (2.20) schreiben:

$$\begin{aligned}
s_i^x &= -s_i'^x, & \forall i \in A; & & s_i^x &= s_i'^x & \forall i \in B \\
s_i^y &= s_i'^y, & \forall i \in A, B \\
s_i^z &= -s_i'^z, & \forall i \in A; & & s_i^z &= s_i'^z & \forall i \in B.
\end{aligned} \tag{2.21}$$

In (2.21) bezeichnen A und B jeweils das Up-Spin- bzw. das Down-Spin-Untergitter. Somit ist für die Down-Spins aus Untergitter B keine Drehung des Koordinatensystems nötig. Für die Up-Spins aus Untergitter A verwendet man eine Drehung um $\delta_{i_A} = \pi$. Als weiteres Beispiel soll die Koordinatentransformation für das Produkt zweier Spins angegeben werden. Werden beide Spins lokal um δ_i bzw. δ_j gedreht, so ist das Produkt dieser Spins in lokal rotierten Koordinaten nur vom Winkel zwischen den Spins $\alpha = \delta_j - \delta_i$ abhängig:

$$\begin{aligned}
\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j &= \frac{1}{2}[\cos(\alpha) + 1](s_i'^x s_j'^x + s_i'^y s_j'^y) \\
&+ \frac{1}{2}[\cos(\alpha) - 1](s_i'^x s_j'^x + s_i'^y s_j'^y) \\
&+ \sin(\alpha)(s_i'^x s_j'^z - s_i'^z s_j'^x) + \cos(\alpha) s_i'^z s_j'^z \\
&= \frac{1}{4}[\cos(\alpha) + 1](s_i'^+ s_j'^- + s_i'^- s_j'^+) \\
&+ \frac{1}{4}[\cos(\alpha) - 1](s_i'^+ s_j'^+ + s_i'^- s_j'^-) \\
&+ \frac{1}{2} \sin(\alpha)(s_i'^+ s_j'^z + s_i'^- s_j'^z - s_i'^z s_j'^+ - s_i'^z s_j'^-) + \cos(\alpha) s_i'^z s_j'^z.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Einen mittels (2.22) transformierten Hamilton-Operator (dort (4.5)) findet man z.B. im späteren Abschnitt 4.2. In (2.22) wurden die Einzelspin-Operatoren s_i^x bzw. s_j^y auf ihre Darstellung mittels Spinflip-Operatoren s_i^+ bzw. s_j^- umgeschrieben:

$$s^\pm = s^x \pm is^y. \quad (2.23)$$

Als nächsten Schritt setzt man die Transformationsgleichungen in den Hamilton-Operator des Systems ein. Der aus der Einsetzung hervorgegangene Hamilton-Operator H' wirkt auf den Modellzustand so, wie der Hamilton-Operator ohne Berücksichtigung der Transformation auf den ursprünglichen Modellzustand. (Der Akzent zur Kennzeichnung der Koordinatentransformation wird im Folgenden weggelassen, da keine Verwechslungen zu befürchten sind.)

2.3.2 Approximationsschemata

Für die Anwendung der CCM auf Spinsysteme werden verschiedene Schemata verwendet. Um diese zu beschreiben, soll zunächst ein Ausdruck für den Korrelationsoperator für Spinsysteme angegeben werden. An Stelle von (2.5) kann man mit (2.19) allgemein für den Korrelationsoperator für Quantenspinsysteme schreiben:

$$S = \sum_L [L] C_L^+ = \sum_{l=1}^{\infty} A_l \text{ mit } A_l \equiv \sum_{i_1 i_2 \dots i_l} [i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ \dots s_{i_l}^+. \quad (2.24)$$

In dieser Gleichung bezeichnet $L = i_1 \dots i_l$ eine spezielle Spinkonfiguration und $[L] = [i_1 \dots i_l]$ den zugehörigen Ket-Korrelationskoeffizienten. Die Summation läuft über alle Gitterplätze und berücksichtigt so auch alle denkbaren Konfigurationen.

Folgende Schemata sind bei der Näherung von S gebräuchlich:

1. *SUBn*-Näherungsschema:

$$S = \sum_{l=1}^n A_l. \quad (2.25)$$

Diese Näherung berücksichtigt alle Konfigurationen mit bis zu n Spinflips.

2. *LSUBn*-Näherungsschema:

$$L \in SUBn \text{ mit } K(L) < n \text{ und } K(L) = \max_{a,b=1 \dots l} d(i_a, i_b). \quad (2.26)$$

In (2.26) ist $d(i, j)$ der Abstand innerhalb der Konfiguration. Nach (2.26) werden in der *LSUBn*-Näherung nur Konfigurationen berücksichtigt, die in ein Gebiet mit nicht mehr als n aneinander grenzenden Gitterplätzen hineinpassen. *LSUBn* ist eine Untermenge von *SUBn*.

3. *SUBn - m*-Näherungsschema:

$$L \in SUBn \text{ mit } K(L) < m \text{ und } K(L) = \max_{a,b=1 \dots l} d(i_a, i_b). \quad (2.27)$$

Es werden in *SUBn - m* nur Konfigurationen berücksichtigt, die in ein Gebiet mit nicht mehr als m aneinander grenzenden Gitterplätzen hineinpassen und n -Spinflips nach dem *SUBn*-Näherungsschema beinhalten. Wie man diese Konfigurationen ermittelt, wird in Abschnitt 2.3.4 erklärt. *SUBn - m* ist ebenfalls eine Untermenge von *SUBn*. Für $s = \frac{1}{2}$ und $n = m$ sind das *LSUBn*- und das *SUBn - m*-Näherungsschema identisch. Für die allgemeine Spinquantenzahl s gilt: $LSUBn = SUBn - m$, falls $n = 2 \cdot s \cdot m$.

Die $SUBn$ -Näherung wird in dieser Arbeit nicht verwendet, obwohl man wegen der Einbindung von Spin-Spin-Wechselwirkungen über große Distanzen Vorteile bei der Beschreibung von Phasenübergängen erwarten könnte. Anwendungen haben jedoch gezeigt, dass die Gleichungen ab $n > 2$ zum einen schwierig zu finden sind und zum anderen nicht gelöst werden konnten. Ein $SUB4$ -Gleichungssystem für einen anisotropen Heisenberg-Antiferromagneten (XXZ-Modell) wurde in [19] zwar angegeben, eine vollständige Lösung ist jedoch bis auf die Untermenge $LSUB4$ noch nicht gelungen. Auch wurde im Rahmen dieser Arbeit (Kapitel 4) das Verhalten des Ordnungsparameters mit wachsendem m in $SUB2 - m$ untersucht und mit den Ergebnissen aus den Näherungsstufen $LSUBn$ verglichen. Für das gewählte Modell gilt hierbei $SUB2 - 2 = LSUB2$ sowie $SUB2 - \infty = SUB2$. Insgesamt liegen die $SUB2 - m$ -Resultate für den Ordnungsparameter dicht beieinander und sind ab $m > 10$ nicht mehr unterscheidbar. Die Genauigkeit der Ergebnisse ist mit den Resultaten in $LSUB2$ vergleichbar. Eine deutliche Verbesserung der Genauigkeit findet man erst in den $LSUB4$ -Ergebnissen. Die Einbeziehung größerer Cluster ist für eine genaue Bestimmung des Ordnungsparameters (und damit für die Untersuchung von Quantenphasenübergängen) demnach entscheidender als die Hinzunahme von Spin-Spin-Korrelationen über größere Abstände⁹. Es wurden in [19] auch Kombinationen ($SUBn + LSUBn$) und Modifikationen ($PSUBn$) der Approximationsschemata betrachtet, allerdings konnten sich diese nicht durchsetzen oder die erwarteten Verbesserungen in den Genauigkeiten wurden nicht erreicht. Im Folgenden werden das $LSUBn$ - und auch das $SUBn - m$ -Näherungsschema weiter betrachtet. Beide Schemata erlauben eine sehr systematische Vergrößerung der Näherungsstufe n , sind in konkreten Anwendungen wesentlich einfacher in der Handhabung und besitzen den Vorteil, dass die entsprechenden Konfigurationen und Gleichungssysteme unter Verwendung von Computeralgorithmen bestimmt und iterativ gelöst werden können. Insbesondere ergibt sich dadurch die Möglichkeit, sehr systematisch und physikalisch motiviert hohe Näherungsstufen zu berechnen. Hierin liegt auch der Grund für die hohe Genauigkeit, die mit der Methode erzielt werden kann. Die Näherung durch Verwendung eines Approximationsschemas ist die einzige Näherung innerhalb der CCM. Hier soll noch explizit angemerkt werden, dass es sich bei der CCM, trotz der Beschränkung auf Konfigurationen mit bestimmten Eigenschaften, von vornherein nicht um eine *finite-size*-Methode handelt. In diesem Sinne ist die CCM automatisch eine Methode für unendliche Systeme.

2.3.3 Ähnlichkeitstransformation

In den Gleichungen (2.11) und (2.13) ist der Hamilton-Operator in Ähnlichkeitstransformierter Form enthalten:

$$\hat{H} = e^{-S} H e^S. \quad (2.28)$$

Der Hamilton-Operator des Heisenberg-Modells beinhaltet Produkte von Einzelspin-Operatoren der Form $s_i^\alpha s_j^\beta$. Die Ähnlichkeitstransformation kann man für die Bestandteile (s^+ , s^- , s^z) von H einzeln vornehmen, weil gilt:

$$e^{-S} s_i^\alpha s_j^\beta e^S = e^{-S} s_i^\alpha e^S e^{-S} s_j^\beta e^S. \quad (2.29)$$

Um die Ket-Gleichung (2.11) aufzustellen, benötigt man den Ausdruck $\hat{H}|\Phi\rangle = e^{-S} H e^S |\Phi\rangle$. Unter Verwendung der Darstellung für den Ket-Korrelations-

⁹In [15] wurde eine vergleichbare Aussage für das $J - J'$ -Modell gefunden.

operator (2.24) und bei Verwendung folgender Eigenschaften für die Einzelspin-Operatoren:

$$[s_k^z, s_m^\pm]_- = \pm s_k^\pm \delta_{km}, \quad [s_k^+, s_m^-]_- = 2s_k^z \delta_{km}, \quad (2.30)$$

erhält man die transformierten Einzelspin-Operatoren, unabhängig von der Näherung für S:

$$\begin{aligned} \hat{s}_k^+ &= s_k^+ \\ \hat{s}_k^z &= s_k^z + F_k s_k^+ \\ \hat{s}_k^- &= s_k^- - 2F_k s_k^z - G_{kk} s_k^+ - F_k^2 s_k^+. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Hier wurde berücksichtigt, dass die Einzelspin-Operatoren s_i^x bzw. s_j^y auf ihre Darstellung mittels Spinflip-Operatoren s_i^+ bzw. s_j^- umgeschrieben werden können (2.23). Für den Fall $s = \frac{1}{2}$ ist $G_{kk} = 0$, weil $(s^+)^2 | \downarrow \rangle = 0$. Die Näherung innerhalb der CCM kommt zustande, indem man in (2.31) nur eine bestimmte Anzahl von Summanden aus den folgenden Operatoren [20] berücksichtigt ($k \neq m$):

$$\begin{aligned} F_k &\equiv \sum_{l=0} (l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ \\ G_{km} &\equiv \sum_{l=0} (l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k m i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ \\ M_{kmn} &\equiv \sum_{l=0} (l+3)(l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k m n i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ \\ N_{kmnp} &\equiv \sum_{l=0} (l+4)(l+3)(l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k m n p i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Man schreibt anschließend den Ausdruck $\hat{H}|\Phi\rangle$ so auf, dass er keine Spinvernichtungsoperatoren enthält. Dazu verwendet man folgende Kommutatoren:

$$\begin{aligned} [s_k^z, F_m]_- &= G_{km} s_k^+ \\ [s_k^-, F_m]_- &= -2G_{km} s_k^z - M_{kkm} s_k^+ \\ [s_k^z, F_m^2]_- &= 2F_m G_{km} s_k^+ \\ [s_k^z, G_{mn}]_- &= M_{kmn} s_k^+ \\ [s_k^-, F_m^2]_- &= -2G_{km}^2 s_k^+ - 4F_m G_{km} s_k^z - 2F_m M_{kkm} s_k^+ \\ [s_k^z, M_{mnp}]_- &= N_{kmnp} s_k^+ \\ [s_k^-, G_{mn}]_- &= -2M_{kmn} s_k^z - N_{kkmn} s_k^+, \end{aligned} \quad (2.33)$$

mit denen man die s^- -Operatoren nach rechts verschieben kann und nutzt $s^-|\Phi\rangle = 0$. Mittels (2.31), (2.32) und (2.33) kann man die einzelnen Terme in H nach der Ähnlichkeitstransformation, angewendet auf $|\Phi\rangle$, aufschreiben. Dies soll an einem Beispiel

dargestellt werden:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= (s_k^- - 2F_k s_k^z - G_{kk} s_k^+ - F_k^2 s_k^+) (s_m^- - 2F_m s_m^z - G_{mm} s_m^+ - F_m^2 s_m^+) |\Phi\rangle \\
&= (s_k^- s_m^- - 2s_k^- F_m s_m^z - s_k^- G_{mm} s_m^+ - s_k^- F_m^2 s_m^+ - 2F_k s_k^z s_m^- \\
&\quad + 4F_k s_k^z F_m s_m^z + 2F_k s_k^z G_{mm} s_m^+ + 2F_k s_k^z F_m^2 s_m^+ - G_{kk} s_k^+ s_m^- \\
&\quad + 2G_{kk} s_k^+ F_m s_m^z + G_{kk} s_k^+ G_{mm} s_m^+ + G_{kk} s_k^+ F_m^2 s_m^+ - F_k^2 s_k^+ s_m^- \\
&\quad + 2F_k^2 s_k^+ F_m s_m^z + F_k^2 s_k^+ G_{mm} s_m^+ + F_k^2 s_k^+ F_m^2 s_m^+) |\Phi\rangle. \tag{2.34}
\end{aligned}$$

Man verwendet nun die Kommutator-Relationen (2.33), um die Einzelspin-Operatoren nach rechts zu verschieben. Die Größen F_k , G_{km} , M_{kmn} und N_{kmnp} beinhalten nur Spinerzeugungs-Operatoren. Definitionsgemäß kommutieren diese mit den Erzeugungs-Operatoren einzelner Spins s^+ . Man muss deswegen aus (2.34) mittels (2.33) nur die folgenden Terme umformen:

$$\begin{aligned}
-2s_k^- F_m s_m^z &= 4G_{km} s_k^z s_m^z + 2M_{kkm} s_k^+ s_m^z - 2F_m s_k^- s_m^z \\
-s_k^- G_{mm} s_m^+ &= 2M_{kmm} s_k^z s_m^+ + N_{kkmm} s_k^+ s_m^+ - G_{mm} s_k^- s_m^+ \\
-s_k^- F_m^2 s_m^+ &= 2G_{km}^2 s_k^+ s_m^+ + 2F_m M_{kkm} s_k^+ s_m^+ + 4F_m G_{km} s_k^z s_m^+ - F_m^2 s_k^- s_m^+ \\
4F_k s_k^z F_m s_m^z &= 4F_k G_{km} s_k^+ s_m^z + 4F_k F_m s_k^z s_m^z \\
2F_k s_k^z G_{mm} s_m^+ &= 2F_k M_{kmm} s_k^+ s_m^+ + 2F_k G_{mm} s_k^+ s_m^+ \\
2F_k s_k^z F_m^2 s_m^+ &= 4F_k F_m G_{km} s_k^+ s_m^+ + 2F_k F_m^2 s_k^z s_m^+. \tag{2.35}
\end{aligned}$$

Setzt man die Terme aus (2.35) in (2.34) ein und streicht alle Terme mit Spinvernichtungs-Operatoren heraus, so erhält man nach passender Umordnung:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= [(4G_{km} + 4F_k F_m) s_k^z s_m^z + (N_{kkmm} + 2G_{km}^2 \\
&\quad + 2F_m M_{kkm} + 4F_k F_m G_{km} + G_{kk} G_{mm} + 2F_k M_{kmm} \\
&\quad + G_{kk} F_m^2 + G_{mm} F_k^2 + F_k^2 F_m^2) s_k^+ s_m^+ + (2M_{kkm} + 4F_k G_{km} \\
&\quad + 2F_m G_{kk} + 2F_m F_k^2) s_k^+ s_m^z + (2M_{kmm} + 4F_m G_{km} \\
&\quad + 2F_k G_{mm} + 2F_k F_m^2) s_k^z s_m^+] |\Phi\rangle. \tag{2.36}
\end{aligned}$$

In (2.37) findet man eine Übersicht über alle Wechselwirkungsterme für die allgemeine Spinquantenzahl s ($k \neq m$). Anzumerken ist, dass diese Ausdrücke nicht an spezielle Näherungen gebunden sind. Sie gelten für alle Approximationsstufen. Der Hamilton-Operator lässt sich somit ganz allgemein in seiner Ähnlichkeitstransformierten Darstel-

lung $\hat{H}|\Phi\rangle$ angeben.

$$\begin{aligned}
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= [(4G_{km} + 4F_k F_m) s_k^z s_m^z + (N_{kkmm} + 2G_{km}^2 \\
&\quad + 2F_m M_{kkm} + 4F_k F_m G_{km} + G_{kk} G_{mm} + 2F_k M_{kmm} \\
&\quad + G_{kk} F_m^2 + G_{mm} F_k^2 + F_k^2 F_m^2) s_k^+ s_m^+ + (2M_{kkm} + 4F_k G_{km} \\
&\quad + 2F_m G_{kk} + 2F_m F_k^2) s_k^+ s_m^z + (2M_{kmm} + 4F_m G_{km} \\
&\quad + 2F_k G_{mm} + 2F_k F_m^2) s_k^z s_m^+] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= (-2F_m s_k^+ s_m^z - G_{mm} s_k^+ s_m^+ - F_m^2 s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= (-2F_k s_k^z s_m^+ - G_{kk} s_k^+ s_m^+ - F_k^2 s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= (s_k^z s_m^z + G_{km} s_k^+ s_m^+ + F_m s_k^z s_m^+ + F_k s_k^+ s_m^z + F_k F_m s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= (s_k^+ s_m^z + F_m s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= (s_k^z s_m^+ + F_k s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= [(-M_{kkm} - 2F_k G_{km} - G_{kk} F_m - F_k^2 F_m) s_k^+ s_m^+ \\
&\quad - 2G_{km} s_k^z s_m^+ - 2F_k F_m s_k^z s_m^+ - G_{kk} s_k^+ s_m^z - F_k^2 s_k^+ s_m^z - 2F_k s_k^z s_m^z] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= [(-M_{kmm} - 2F_m G_{km} - G_{mm} F_k - F_k F_m^2) s_k^+ s_m^+ \\
&\quad - 2G_{km} s_k^+ s_m^z - 2F_k F_m s_k^+ s_m^z - G_{mm} s_k^z s_m^+ - F_m^2 s_k^z s_m^+ - 2F_m s_k^z s_m^z] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= s_k^+ s_m^+ |\Phi\rangle. \tag{2.37}
\end{aligned}$$

In (2.38) findet man eine Übersicht über alle Wechselwirkungsterme für den Spezialfall $s = \frac{1}{2}$. Man erhält diese Ausdrücke aus (2.37) unter Berücksichtigung von $s^z|\Phi\rangle = -\frac{1}{2}|\Phi\rangle$ sowie der Tatsache, dass $G_{km} = M_{kmn} = N_{kmnp} = 0$ werden, falls zwei der Indizes übereinstimmen. Die Größen G_{mm} , G_{kk} , M_{kkm} , M_{kmm} und N_{kkmm} in (2.37) sind somit für $s = \frac{1}{2}$ Null. In (2.37) könnte man noch s^z und s^+ aneinander vorbei tauschen (weil $k \neq m$) und $s^z|\Phi\rangle$ durch $-s|\Phi\rangle$ ersetzen.

Damit ergibt sich folgende Übersicht über die Wechselwirkungsterme für $k \neq m$ und $s = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= [(2G_{km}^2 + 4F_k F_m G_{km} + F_k^2 F_m^2) s_k^+ s_m^+ - (2G_{km} F_m + F_k F_m^2) s_m^+ \\
&\quad - (2G_{km} F_k + F_k^2 F_m) s_k^+ + G_{km} + F_k F_m] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= (-F_m^2 s_k^+ s_m^+ + F_m s_k^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= (-F_k^2 s_k^+ s_m^+ + F_k s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= [(G_{km} + F_k F_m) s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} F_k s_k^+ - \frac{1}{2} F_m s_m^+ + \frac{1}{4}] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= (F_m s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} s_k^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= (F_k s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} s_m^+) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= [(-F_k^2 F_m - 2F_k G_{km}) s_k^+ s_m^+ + (G_{km} + F_k F_m) s_m^+ + \frac{1}{2} F_k^2 s_k^+ - \frac{1}{2} F_k] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= [(-F_k F_m^2 - 2F_m G_{km}) s_k^+ s_m^+ + (G_{km} + F_k F_m) s_k^+ + \frac{1}{2} F_m^2 s_m^+ - \frac{1}{2} F_m] |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= s_k^+ s_m^+ |\Phi\rangle.
\end{aligned} \tag{2.38}$$

2.3.4 Approximation und Aufstellung des Ket-Gleichungssystems

Wie im Abschnitt (2.3.2) angegeben, erfolgt die Umsetzung einer Näherung innerhalb der CCM durch eine Beschränkung auf bestimmte Spinkonfigurationen (z.B. Limitierung der Anzahl der Spins pro Cluster oder Limitierung der Größe der Cluster). Unter zusätzlicher Berücksichtigung von Gittersymmetrien verbleiben dann letztendlich sogenannte *fundamentale* Konfigurationen. Ein wichtiger Arbeitsschritt ist es, diese fundamentalen Konfigurationen zu finden, was im Folgenden beschrieben werden soll. Als Beispiel werden hierbei die fundamentalen Konfigurationen für das quadratische Gitter ($s = \frac{1}{2}$) bis zur Näherungsstufe *LSUB4* bestimmt. Die Beschreibung orientiert sich dabei an der für diese Arbeit verwendeten analytischen Vorgehensweise¹⁰. Zunächst unterscheidet man zwischen verbundenen und unverbundenen Konfigurationen.

- **verbundene Konfigurationen**

Von jedem Gitterplatz gelangt man innerhalb der Konfiguration zu jedem anderen Gitterplatz über nächste Nachbarn, ohne auf freie Felder zu treffen. Man nennt diese Objekte je nach Zusammenhang auch *lattice animals* oder *polyominoes*¹¹.

¹⁰Im für diese Arbeit verwendeten numerischen Programmpaket [5] zur Berechnung hoher Näherungsstufen wird ein etwas effektiverer Algorithmus verwendet.

¹¹Die Untersuchung solcher Formen auf regulären Gittern (insbesondere das asymptotische Verhalten bei zunehmender Clustergröße) sind Gegenstand aktueller Forschung. In diesem Sinne sind die *lattice animals* bereits selbst Forschungsgegenstand in der Kombinatorik. Darüber hinaus gibt es zahlreiche wissenschaftliche Anwendungen (Zahlenpartitionierung, Polymer-Modellierung, Perkolations-theorie, Zellwachstumsprozesse,...), bei denen die *lattice animals* relevant werden. Mittlerweile gibt es sehr effektive parallelisierte Algorithmen [21], mit denen die *lattice animals* bestimmt werden können. In [22] ist z.B. die Anzahl der *lattice animals* für das Quadratgitter bis zur Clustergröße $n = 56$ zu $N_{la} = 69\ 150\ 714\ 562\ 532\ 896\ 936\ 574\ 425\ 480\ 218$ bestimmt. Für das Erreichen hoher CCM-Näherungsstufen ist jedoch der Aufwand der Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen weniger

- **unverbundene Konfigurationen**

Man erhält unverbundene Konfigurationen, indem man in den verbundenen Konfigurationen systematisch Gitterplätze unberücksichtigt lässt.

Zunächst kann man zum Auffinden der möglichen Konfigurationen ein rechtwinkliges Dreieck (Abb.2.3) verwenden. Wie in der Abbildung dargestellt, numeriert man alle Plätze des Dreiecks. Man kann so jeder Konfiguration einen identifizierenden Zahlenwert zuordnen. In [15] wurde diese Vorgehensweise im Rahmen eines Computerprogramms verwendet. Für analytische Bestimmungen der Konfigurationen beschränkt man sich jedoch nur auf niedrigste Näherungsstufen, so dass man auf die Numerierung auch verzichten kann.

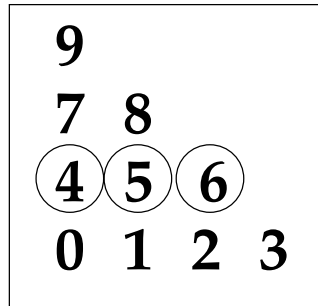


Abbildung 2.3: Beispiel für ein Begrenzungsdreieck auf dem quadratischen Gitter mit der Seitenlänge $n = 4$; in diesem Dreieck gibt es $\frac{n(n+1)}{2}$ nummerierte Gitterplätze. Die Kreise kennzeichnen die Spins einer verbundenen Konfiguration mit drei Spins. Der Zahlenwert der Konfiguration beträgt: $2^4 + 2^5 + 2^6 = 112$ (im Exponenten steht jeweils die Platznummer der (eingekreisten) Spins, die zu einer Konfiguration gehören).

Die weitere Vorgehensweise soll am quadratischen Gitter in der Näherungsstufe *LSUB4* gezeigt werden, wenn als Modellzustand der Néel-Zustand verwendet wird.

1. Ohne Berücksichtigung irgendwelcher Symmetrien bestimmt man nacheinander alle Formen mit k Gitterplätzen (man beginnt üblicherweise bei $k = 1$) und durch Hinzufügen eines nächsten Nachbarn alle Formen mit $k + 1$ Gitterplätzen. Diesen Vorgang wiederholt man, bis man die für die Näherungsstufe vorgegebene Maximalgröße erreicht hat (hier $k = 4$).
2. Die unter Punkt 1 ermittelten Konfigurationen werden darauffolgend den für das Modell entsprechenden Symmetrietransformationen unterworfen. Die daraus hervorgehenden transformierten Konfigurationen werden unter Beachtung der Translationssymmetrie ins Begrenzungsdreieck verschoben und miteinander verglichen.

Sind unter Berücksichtigung der Symmetrien zwei oder mehrere Konfigurationen aufeinander abbildbar, so wird nur eine von ihnen (mit dem kleinsten Zahlenwert) weiter verwendet. Eine Liste aller verbundenen Konfigurationen des gewählten Beispiels gibt Abb. 2.4. Die unverbundenen Konfigurationen erhält man nun, indem man aus den ver-

entscheidend, da das iterative Lösen der (nichtlinearen) Gleichungssysteme oft schon bei vergleichbar kleiner Clustergröße ($n \approx 12$ für zweidimensionale Systeme) gegenwärtig durch die Rechnerkapazitäten (Speicher) limitiert wird (hierzu auch siehe Anhang A.2).

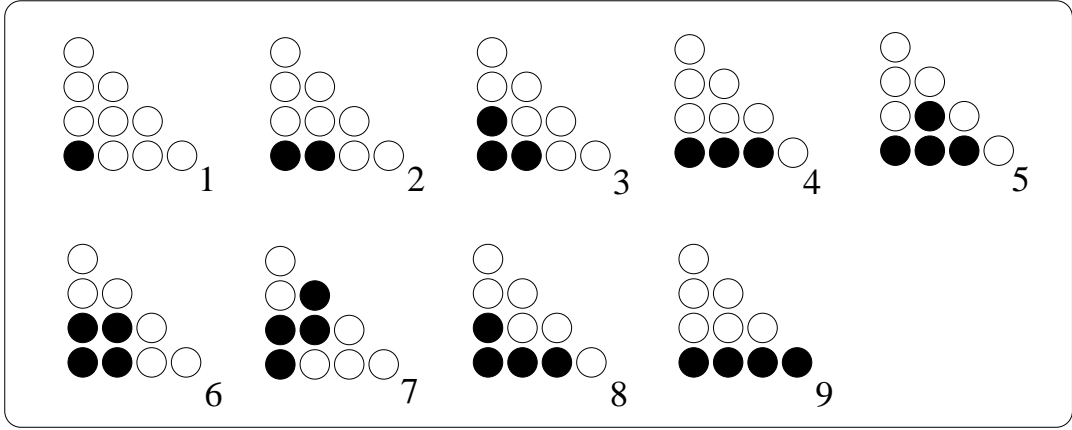


Abbildung 2.4: Verbundene Konfigurationen für das quadratische Spin- $\frac{1}{2}$ -Gitter in *LSUB4*; die Konfigurationen wurden fortlaufend numeriert, die vollen Kreise symbolisieren die Position eines Spins.

bundenen Konfigurationen systematisch Gitterplätze entfernt. Für diese benutzt man ebenfalls die zuvor beschriebene Vorgehensweise. Sie können allerdings nur dann zu einer fundamentalen Konfiguration werden, wenn sie neu sind. Lässt man z.B. aus 2 (Abb. 2.4) einen Gitterplatz weg, so erhält man 1, also keine neue Konfiguration. Eine Übersicht über die unverbundenen Konfigurationen beinhaltet Abbildung 2.5. Es wurden somit für den Grundzustand 17 Konfigurationen bestimmt, die auch unter Berücksichtigung aller Gittersymmetrien verschieden sind. In Abhängigkeit von der speziellen Wahl des Modellzustandes verschwinden für einige dieser Konfigurationen darüber hinaus die Korrelationskoeffizienten (sie zählen somit ebenfalls nicht zu den fundamentalen Konfigurationen). Die z -Komponente des totalen Spins $s_T^z = \sum_i s_i^z$ (Summe über alle Gitterplätze) kommutiert mit dem Hamilton-Operator des Heisenberg-Modells. Wählt man, wie im Beispiel, als CCM-Modellzustand den Néel-Zustand, so kann man s_T^z explizit erhalten, weil der Néel-Zustand ein Eigenzustand von s_T^z ist. Man verwendet für den Grundzustand nur Konfigurationen, die keine Änderung von s_T^z in Bezug auf den Néel-Modellzustand bewirken. $s_{A(B),T}^z$ sei die totale z -Komponente für Spins im $A(B)$ Untergitter. Für das transformierte s_T^z folgt dann (Néel-Zustand):

$$s_T^z = s_{B,T}^z - s_{A,T}^z. \quad (2.39)$$

Letzteres bedeutet also, dass für jede Konfiguration die Anzahl der Spinflips im A -Untergitter gleich der Anzahl der Spinflips im B -Untergitter sein muss. Für $s = \frac{1}{2}$ tragen so im Grundzustand alle Konfigurationen mit einer ungeraden Anzahl von beteiligten Gitterplätzen nichts bei. Nimmt man also als letztes die s_T^z -Erhaltung hinzu, so tragen nur die Konfigurationen 2,6,7,8,9,13 und 16 etwas bei, weil bei ihnen die Zahl der zu berücksichtigenden Gitterplätze pro Untergitter gleich groß ist. Man erhält somit für das Spin- $\frac{1}{2}$ Quadratgitter in *LSUB4* 7 *fundamentale* Konfigurationen.

Für Spins mit $s > \frac{1}{2}$ kann man prinzipiell genauso vorgehen, muss allerdings beachten, dass nun mehr als ein Erzeugungsoperator auf einen Gitterplatz wirken kann, ohne dass ein verschwindender Beitrag entsteht. Für $s = \frac{1}{2}$ ist $(s^-)^2 | \uparrow \rangle = 0$, womit folgt, dass nicht zwei oder mehrere Operatoren zum gleichen Gitterplatz gehören dürfen. Für $s = \frac{n}{2}$ ($n \in \mathbb{N}$, $n > 1$) wäre z.B. erst $(s^+)^{n+1} | \downarrow \rangle = 0$ und es dürften somit prinzipiell n -

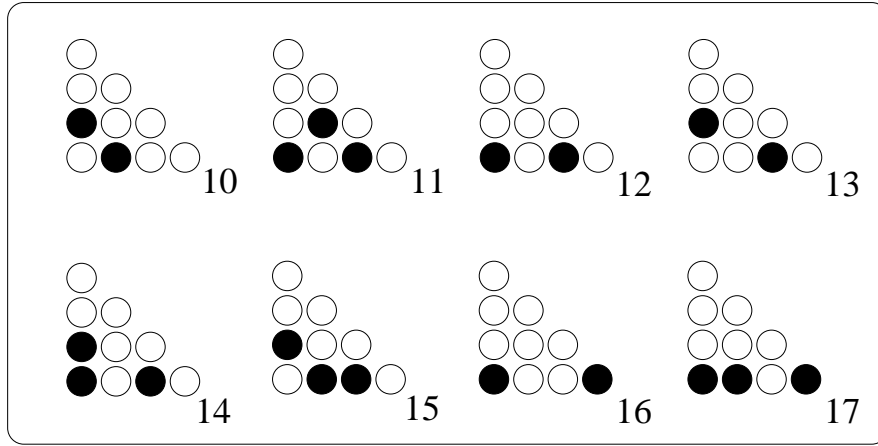


Abbildung 2.5: Liste der unverbundenen Konfigurationen für das quadratische Spin- $\frac{1}{2}$ -Gitter in *LSUB4*.

Erzeugungs-Operatoren mit $n > 1$ auf den gleichen Gitterplatz wirken. Damit wächst die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen innerhalb einer Näherungsstufe auch mit dem Spin s an. Abbildung 2.6 zeigt als Beispiel die 30 fundamentalen Konfigurationen für das quadratische Spin-1-Gitter in *LSUB4* (für Spin $s = \frac{3}{2}$ gibt es bereits 77 fundamentale Konfigurationen).

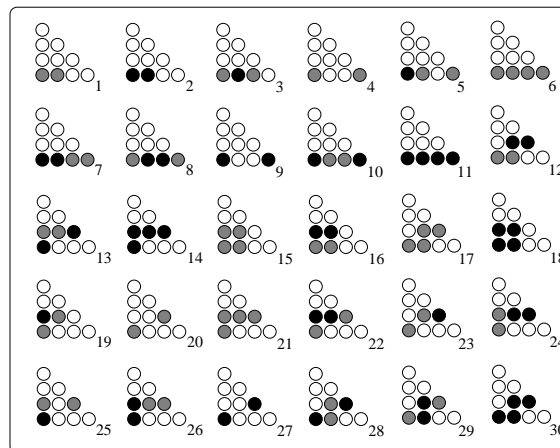


Abbildung 2.6: Liste der fundamentalen Konfigurationen für das quadratische Spin-1-Gitter in *LSUB4*. Auf einen grauen Gitterplatz wirkt ein und auf einen schwarzen Gitterplatz wirken zwei Erzeugungs-Operatoren.

Für jede der so bestimmten fundamentalen Konfigurationen gibt es genau eine Ket-Gleichung. Um diese dann zu lösen, werden in $e^{-S}He^S|\Phi\rangle$ (vgl. 2.37 bzw. 2.38) diejenigen s^+ -Terme ausgewählt, deren Indizes mit denen der Konfiguration $[i_1 \dots i_l]$ übereinstimmen. Wegen:

$$\langle \Phi | s_i^- s_j^+ | \Phi \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.40)$$

erhält man so die Terme der Gleichung, die etwas beitragen. Da die Anzahl k der s^- -Operatoren nach der Wahl der Näherungsstufe feststeht, braucht man in den Ausdrücken aus (2.38) nur die Terme für den Ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Opera-

tor (2.29) zu verwenden, die ebenfalls insgesamt nur k s^+ -Operatoren beinhalten. Ein Beitrag entsteht nur, wenn die Vernichtungsoperatoren der Konfiguration die Wirkung der Erzeugungs-Operatoren aus dem Ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Operator auf den Modellzustand $|\Phi\rangle$ rückgängig machen.

Die Ket-Gleichungen bilden, wie bereits angegeben, ein nichtlineares Gleichungssystem für die Ket-Korrelationskoeffizienten $\{a_L\}$ der fundamentalen Konfigurationen, was numerisch gelöst wird.

2.3.5 Grundzustandsenergie

Die Grundzustandsenergie wird nach (2.9) berechnet. Im Ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Operator $e^{-S}He^S|\Phi\rangle$ sind nur die Terme relevant, die keine Spinerzeugungs-Operatoren enthalten (in (2.9) sind im Unterschied zu den Ket-Gleichung auch keine Vernichtungs-Operatoren enthalten). Der Ausdruck für die Grundzustandsenergie ist über das Spinmodell hinausgehend nur von den Ket-Korrelationskoeffizienten $[k]$ und $[km]$ abhängig und für jede Approximation gleich. Lediglich der numerische Wert für die Korrelationskoeffizienten ändert sich mit der Näherungsstufe, womit sich auch der Wert für die Grundzustandsenergie ändert.

2.3.6 Aufstellung des Bra-Gleichungssystems

Um einen beliebigen Erwartungswert, wie z.B. einen Ordnungsparameter, zu bestimmen, benötigt man neben dem Ket-Zustand auch den Bra-Zustand. Hierzu formt man (2.13) geeignet um [15].

Startpunkt der Überlegungen sei der Ausdruck für den Erwartungswert des Hamilton-Operators:

$$\bar{H} = \langle \tilde{\Psi} | H | \Psi \rangle = \langle \Phi | \tilde{S} e^{-S} H e^S | \Phi \rangle. \quad (2.41)$$

Setzt man in diese Gleichung den Ausdruck für den Korrelationsoperator des Bra-Zustandes

$$\tilde{S} = 1 + \sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} \widetilde{[i_1 \dots i_l]} s_{i_1}^- \dots s_{i_l}^- \quad (2.42)$$

ein, so folgt:

$$\bar{H} = \langle \Phi | e^{-S} H e^S | \Phi \rangle + \sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} \widetilde{[i_1 \dots i_l]} \langle \Phi | s_{i_1}^- \dots s_{i_l}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle. \quad (2.43)$$

Der erste Term stellt die Grundzustandsenergie dar, der zweite beinhaltet die Ket-Gleichung, die im Grundzustand Null ergibt. Die Summe in (2.43) läuft über das gesamte Gitter. Steht N für die Anzahl der Gitterplätze, so folgt für $N \rightarrow \infty$, dass sie unendlich viele Summanden beinhaltet, unabhängig von der gewählten Näherung. Will man (2.43) dennoch zur Berechnung der Bra-Korrelationskoeffizienten benutzen, so muss ein Weg gefunden werden, diese unendliche Summe und die endliche Zahl der Koeffizienten der $LSUBn$ -Näherung zu verbinden. Dazu nutzt man aus, dass es innerhalb einer Näherungsstufe nur eine endliche Anzahl (N_f) von fundamentalen Konfigurationen gibt. Demzufolge sind auch nur N_f Koeffizienten $[i_1 \dots i_l]$ und $\widetilde{[i_1 \dots i_l]}$ für den Ket-Zustand bzw. Bra-Zustand voneinander verschieden. Diese verschiedenen Korrelationskoeffizienten werden nun mit L_r bzw. \tilde{L}_r bezeichnet. Der Index r kennzeichnet

die zugehörige fundamentale Konfiguration, welche n_r Gitterplätze beinhaltet. Innerhalb einer Näherungsstufe $LSUBn$ sollen diese Koeffizienten für jede fundamentale Konfiguration genau einmal gezählt werden. Für jedes L_r (bzw. \tilde{L}_r) gibt es jedoch $N\nu_r(n_r!)$ gleichartige Konfigurationen auf dem Gitter. Man erhält diesen Ausdruck unter Einbeziehung der Translationssymmetrie (N), der Punktsymmetrie (ν_r) und der Berücksichtigung der Permutationen der Spinindizes ($n_r!$). Deswegen kann man für die Koeffizienten in \tilde{S} (2.42) schreiben:

$$\sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} \widetilde{[i_1 \dots i_l]} = \sum_{r=1}^{N_f} N\nu_r(n_r!) \tilde{L}_r. \quad (2.44)$$

Ein analoger Ausdruck gilt für die Ket-Koeffizienten (ohne Tilde). Mit den Abkürzungen $a_r \equiv L_r$, $\tilde{a}_r \equiv \nu_r(n_r!) \tilde{L}_r$ und mit $K_r = K_r(a_1, a_2, \dots) = 0$ als Ket-Gleichung für die r -te Konfiguration folgt eingesetzt in (2.43):

$$\bar{H} = \bar{E} + N \sum_{r=1}^{N_f} \tilde{a}_r K_r, \quad (2.45)$$

oder spezifisch pro Gitterplatz:

$$\bar{H}^* = \bar{E}^* + \sum_{r=1}^{N_f} \tilde{a}_r K_r. \quad (2.46)$$

Leitet man (2.46) nach den a_i ab und berücksichtigt die Ket-Gleichung, so erhält man ein lineares Gleichungssystem von N_f Gleichungen für die Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_r in Abhängigkeit von den Ket-Korrelationskoeffizienten a_r :

$$\frac{\partial \bar{H}^*}{\partial a_i} = 0 = \frac{\partial \bar{E}^*}{\partial a_i} + \sum_{r=1}^{N_f} \tilde{a}_r \frac{\partial K_r}{\partial a_i}. \quad (2.47)$$

(2.47) benutzt man letztendlich zur Berechnung der Bra-Korrelationskoeffizienten.

2.3.7 CCM für den angeregten Zustand

In den vorangegangenen Abschnitten wurde der Formalismus der CCM für den Grundzustand beschrieben. Nun soll kurz eine Vorgehensweise angegeben werden, wie man prinzipiell die CCM auch für angeregte Zustände verwenden kann [15, 23, 24]. Die Betrachtungen beziehen sich hierbei wie beim Grundzustand auf Spins mit $s \geq \frac{1}{2}$.

Da es hier zahlreiche Analogien zu den Betrachtungen beim Grundzustand gibt, kann dieser Abschnitt somit etwas kürzer gefasst werden.

Den Ket-Zustand des angeregten Zustandes erhält man durch Anwendung eines linearen Operators X auf den Ket-Grundzustand $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi_e\rangle = X e^S |\Phi\rangle, X = \sum_{L \neq 0} [L]_e C_L^+ = \sum_{i_1} [i_1]_e s_{i_1}^+ + \sum_{i_1 i_2} [i_1 i_2]_e s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ + \dots \quad (2.48)$$

In (2.48) ist $|\Psi_e\rangle$ der angeregte Ket-Zustand und $[i_1 \dots i_l]_e$ bezeichne die Korrelationskoeffizienten dieses angeregten Zustandes. Eine Anregung entsteht hier dadurch, dass

die Anwendung von Spinflip-Operatoren auf den Grundzustand angeregte Zustände beschreiben. Die Definitionen von X (2.48) und S (2.24) sind formal identisch. Für den Operator X muss man analog zum Grundzustand ein Approximationsschema verwenden. Man benutzt hierbei dieselbe Näherung wie für den Grundzustand. Für beide werden auch fundamentale Konfigurationen bestimmt, allerdings auf verschiedene Weise (siehe Ende dieses Abschnittes). Im Folgenden soll eine Eigenwertgleichung abgeleitet werden, mit der man die Differenz zwischen Grundzustandsenergie und der Anregungsenergie ermitteln kann.

Die Eigenwertgleichung für den Hamilton-Operator im angeregten Zustand lautet:

$$H|\Psi_e\rangle = E_e|\Psi_e\rangle. \quad (2.49)$$

Da X und S kommutieren, folgt wegen (2.5):

$$e^{-S}HXe^S|\Phi\rangle = E_eX|\Phi\rangle \text{ und } e^{-S}XHe^S|\Phi\rangle = EX|\Phi\rangle. \quad (2.50)$$

Bezeichne nun $\epsilon = E_e - E$ die Differenz zwischen der Energie des angeregten Zustandes E_e und der Grundzustandsenergie E , so folgt:

$$\epsilon X|\Phi\rangle = e^{-S}[H, X]_-e^S|\Phi\rangle. \quad (2.51)$$

Auf diese Gleichung wird nun $\langle\Phi|s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^-$ angewendet, wobei $j_1 \dots j_l$ eine fundamentale Konfiguration des angeregten Zustandes sei:

$$\langle\Phi|s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- \epsilon_e X|\Phi\rangle = \epsilon_e \langle\Phi|s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- \sum_{i_1 \dots i_l} [i_1 \dots i_l]_e s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ |\Phi\rangle = \epsilon_e (l!) [i_1 \dots i_l]_e. \quad (2.52)$$

Damit gilt auch:

$$(l!) \epsilon [i_1 \dots i_l]_e = \langle\Phi|s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- e^{-S}[H, X]_- e^S |\Phi\rangle. \quad (2.53)$$

(2.53) ist linear in X und in den $[i_1 \dots i_l]$. Bezeichnet der Index r die Konfiguration $j_1 \dots j_l$ und x_r^e den zugehörigen Koeffizienten des angeregten Zustandes, so kann man schreiben:

$$\sum_{i=1}^{N_f^e} R_{ri} x_i^e \equiv \langle\Phi|s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- e^{-S}[H, X]_- e^S |\Phi\rangle. \quad (2.54)$$

N_f^e ist die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen des angeregten Zustandes. Die Größen R_{ri} hängen nicht von den $\{x_r^e\}$ ab, sondern nur von den Ket-Korrelationskoeffizienten des Grundzustandes. Es lässt sich also mit (2.53) auch schreiben:

$$\epsilon (n_r!) x_r^e = \sum_{i=1}^{N_f^e} R_{ri} x_i^e. \quad (2.55)$$

Hierbei handelt es sich um eine Eigenwertgleichung für die Eigenwerte ϵ . Viele Aussagen, die in den vorangegangenen Abschnitten zum Grundzustand getroffen wurden, lassen sich leicht auf den angeregten Zustand verallgemeinern. Die Näherung bei der Untersuchung erster Anregungen kommt zustande, indem man nur eine bestimmte

Anzahl von Summanden aus den folgenden Operatoren [24] berücksichtigt:

$$\begin{aligned}
P_k &\equiv \sum_{l=0} (l+1) \sum_{i_1 \cdots i_l} [ki_1 \cdots i_l]_e s_{i_1}^+ \cdots s_{i_l}^+ \\
Q_{km} &\equiv \sum_{l=0} (l+2)(l+1) \sum_{i_1 \cdots i_l} [kmi_1 \cdots i_l]_e s_{i_1}^+ \cdots s_{i_l}^+ \\
R_{kmn} &\equiv \sum_{l=0} (l+3)(l+2)(l+1) \sum_{i_1 \cdots i_l} [kmni_1 \cdots i_l]_e s_{i_1}^+ \cdots s_{i_l}^+ \\
T_{kmnp} &\equiv \sum_{l=0} (l+4)(l+3)(l+2)(l+1) \sum_{i_1 \cdots i_l} [kmnpi_1 \cdots i_l]_e s_{i_1}^+ \cdots s_{i_l}^+. \quad (2.56)
\end{aligned}$$

Diese Operatoren für den angeregten Zustand entsprechen den Operatoren (2.32) für den Grundzustand. Zunächst wird $e^{-S}[H, X]_- e^S |\Phi\rangle$ wieder so umgeformt, dass nur noch Spinerzeugungs-Operatoren enthalten sind. Dazu verwendet man die nützlichen Kommutatoren [24]:

$$\begin{aligned}
[s_k^z, X]_- &= P_k s_k^+ \\
[s_k^-, X]_- &= -2P_k s_k^z - Q_{kk} s_k^+ \\
[s_k^z, P_m]_- &= Q_{km} s_k^+ \\
[s_k^z, Q_{mn}]_- &= R_{kmn} s_k^+ \\
[s_k^z, P_m^2]_- &= 2P_m Q_{km} s_k^+ \\
[s_k^-, P_m]_- &= -2Q_{km} s_k^z - R_{kkm} s_k^+ \\
[s_k^-, P_m^2]_- &= -2Q_{km}^2 s_k^+ - 2P_m R_{kkm} s_k^+ - 4P_m Q_{km} s_k^z \\
[s_k^z, R_{mnp}]_- &= T_{kmnp} s_k^+ \\
[s_k^-, Q_{mn}]_- &= -2R_{kmn} s_k^z - T_{kkmn} s_k^+, \quad (2.57)
\end{aligned}$$

verschiebt analog zur Vorgehensweise beim Grundzustand die s^- -Operatoren nach rechts und nutzt $s^- |\Phi\rangle = 0$. Man bestimmt damit die Wechselwirkungsterme für den

angeregten Zustand, mit denen die Gleichungen (2.54) aufgestellt werden können:

$$\begin{aligned}
e^{-S}[s_i^z s_j^z, X]e^S|\Phi\rangle &= (P_i s_i^+ s_j^z + P_i F_j s_i^+ s_j^+ + P_j s_j^+ s_i^z + P_j F_i s_i^+ s_j^+ + Q_{ij} s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^z s_j^+, X]e^S|\Phi\rangle &= (P_i s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^z s_j^-, X]e^S|\Phi\rangle &= (-2P_i F_j s_i^+ s_j^z - P_i G_{jj} s_i^+ s_j^+ - P_i F_j^2 s_i^+ s_j^+ - 2P_j s_i^z s_j^z - 2P_j F_j s_j^+ s_i^z \\
&\quad - 2P_j F_i s_i^+ s_j^z - 2P_j G_{ij} s_i^+ s_j^+ - 2P_j F_i F_j s_i^+ s_j^+ - 2Q_{ij} s_i^+ s_j^z \\
&\quad - 2Q_{ij} F_j s_i^+ s_j^+ - Q_{jj} s_j^+ s_i^z - Q_{jj} F_i s_i^+ s_j^+ - R_{ijj} s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^+ s_j^z, X]e^S|\Phi\rangle &= (P_j s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^- s_j^z, X]e^S|\Phi\rangle &= (-2P_j F_i s_j^+ s_i^z - P_j G_{ii} s_i^+ s_j^+ - P_j F_i^2 s_j^+ s_i^+ - 2P_i s_i^z s_j^z - 2P_i F_j s_j^+ s_i^z \\
&\quad - 2P_i F_i s_i^+ s_j^z - 2P_i G_{ij} s_i^+ s_j^+ - 2P_i F_i F_j s_i^+ s_j^+ - 2Q_{ij} s_j^+ s_i^z \\
&\quad - 2Q_{ij} F_i s_i^+ s_j^+ - Q_{ii} s_i^+ s_j^z - Q_{ii} F_j s_i^+ s_j^+ - R_{iij} s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^+ s_j^-, X]e^S|\Phi\rangle &= (-2P_j s_i^+ s_j^z - Q_{jj} s_i^+ s_j^+ - 2P_j F_j s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^- s_j^+, X]e^S|\Phi\rangle &= (-2P_i s_j^+ s_i^z - Q_{ii} s_i^+ s_j^+ - 2P_i F_i s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^+ s_j^+, X]e^S|\Phi\rangle &= 0|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^- s_j^-, X]e^S|\Phi\rangle &= (4P_i F_j s_i^z s_j^z + 4P_i G_{ij} s_i^+ s_j^z + 2P_i G_{jj} s_j^+ s_i^z + 2P_i M_{ijj} s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 4P_i F_i F_j s_i^+ s_j^z + 4P_i F_j G_{ij} s_i^+ s_j^+ + 2P_i F_i G_{jj} s_i^+ s_j^+ + 2P_i F_i F_j^2 s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 2P_i F_j^2 s_j^+ s_i^z + 2Q_{ii} F_j s_i^+ s_j^z + Q_{ii} G_{jj} s_i^+ s_j^+ + Q_{ii} F_j^2 s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 4Q_{ij} s_i^z s_j^z + 4Q_{ij} F_j s_j^+ s_i^z + 4Q_{ij} F_i s_i^+ s_j^z + 4Q_{ij} G_{ij} s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 4Q_{ij} F_i F_j s_i^+ s_j^+ + 2R_{iij} s_i^+ s_j^z + 2R_{iij} F_j s_i^+ s_j^+ + 2R_{ijj} s_j^+ s_i^z \\
&\quad + 2R_{ijj} F_i s_i^+ s_j^+ + T_{iijj} s_i^+ s_j^+ + 4P_j G_{ij} s_j^+ s_i^z + 2P_j M_{iij} s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 4P_j F_i s_i^z s_j^z + 4P_j F_i F_j s_j^+ s_i^z + 2P_j G_{ii} s_i^+ s_j^z + 2P_j G_{ii} F_j s_i^+ s_j^+ \\
&\quad + 2P_j F_i^2 s_i^+ s_j^z + 2P_j F_i^2 F_j s_i^+ s_j^+ + 4P_j F_i G_{ij} s_i^+ s_j^+ + 2Q_{jj} F_i s_i^+ s_j^z \\
&\quad + Q_{jj} G_{ii} s_i^+ s_j^+ + Q_{jj} F_i^2 s_i^+ s_j^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^z, X]e^S|\Phi\rangle &= (P_i s_i^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^-, X]e^S|\Phi\rangle &= (-2P_i s_i^z - Q_{ii} s_i^+ - 2P_i F_i s_i^+)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[(s_i^z)^2, X]e^S|\Phi\rangle &= (2P_i s_i^+ s_i^z + Q_{ii} (s_i^+)^2 + P_i (s_i^+)^2 + 2P_i F_i (s_i^+)^2)|\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_i^+, X]e^S|\Phi\rangle &= 0|\Phi\rangle. \tag{2.58}
\end{aligned}$$

Für den Spezialfall $s = \frac{1}{2}$ könnte man (2.58) (erneut vergleichbar zur Vorgehensweise beim Grundzustand) vereinfachen. Die Größen Q_{km} , R_{kmn} und T_{kmnp} verschwinden, falls jeweils zwei der Indizes übereinstimmen. Man erkennt in (2.58), dass die Terme die Operatoren (2.56) (im Unterschied zur Situation beim Grundzustand) nur linear enthalten.

Der sich nun anschließende Formalismus verläuft wie beim Ket-Gleichungssystem. Aus den ähnlichkeitstransformierten Termen $e^{-S}[H, X]_e^S|\Phi\rangle$ ergibt sich ein Beitrag, wenn die Anordnung (Indizes) der in diesen Termen enthaltenen Erzeugungs-Operatoren mit denen der Konfiguration $j_1 \dots j_l$ der Vernichtungs-Operatoren (2.54) übereinstimmen. Hat man alle Terme mit einem Beitrag zum angeregten Zustand gefunden, so kann man die Matrix R_{ri} aufstellen und die Eigenwertgleichung lösen. Um das Energiegap zu berechnen, wird der kleinste Eigenwert aus (2.55) ausgewählt¹². In den folgenden

¹²Die Eigenwerte müssen nicht zwingend reell sein, weil die Matrix R_{ri} nicht symmetrisch ist. Die Erfahrung zeigt jedoch, dass die Eigenwerte in den bisher untersuchten Gittern und in allen

Kapiteln wird dieser kleinste Eigenwert (und damit das Spingap) mit ϵ gekennzeichnet. Abschließend sollen noch einige Bemerkungen angegeben werden, wie man die fundamentalen Konfigurationen des angeregten Zustands (an einem $s = \frac{1}{2}$ Beispielsystem) bestimmt. Wie beim Grundzustand, führt man Schritt 1 und 2 durch (siehe Abschnitt 3.3) und erhält alle fundamentalen Konfigurationen ohne Berücksichtigung der s_T^z -Erhaltung. Zur Bestimmung der niedrigsten Anregungsenergie (unter Verwendung des Néel-Zustandes als CCM-Modellzustand) verwendet man nur Konfigurationen, welche die z -Komponente von s_T^z in Bezug auf den Modellzustand um ± 1 ändern. Hierbei kann man jene Konfigurationen gleich setzen, die eine Änderung von s_T^z um $+1$ und solche, die eine Änderung um -1 bewirken. Grund dafür ist, dass beide Konfigurationstypen wegen einer Spiegelsymmetrie äquivalent sind¹³. Man berücksichtigt also nun alle Konfigurationen, für welche die Zahl der Spins im A - und B -Untergitter genau um 1 verschieden sind. Abbildung 2.7 veranschaulicht diese Konfigurationen am Beispiel des isotropen $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitters in $LSUB4$.

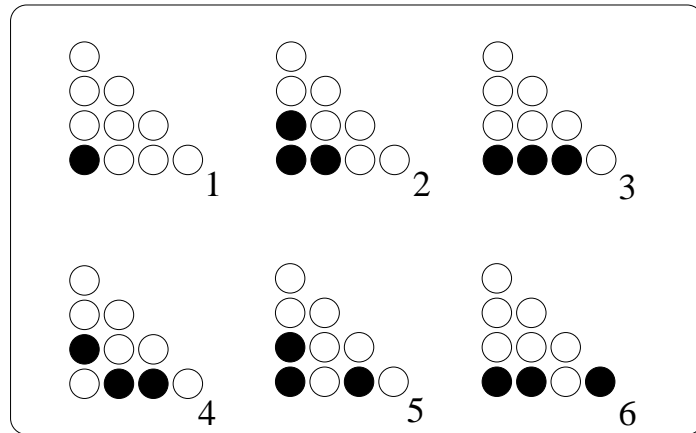


Abbildung 2.7: Übersicht über die fundamentalen Konfigurationen für das quadratische Gitter ($s = \frac{1}{2}$) im ersten Anregungszustand in der Näherungsstufe $LSUB4$ für den Néel-Zustand als CCM-Modellzustand. Die vollen Kreise symbolisieren die Position eines Spins.

2.3.8 Extrapolation der CCM-Resultate

Die CCM-Ergebnisse sind bei geeignetem Modellzustand für $n \rightarrow \infty$ (n ist die Näherungsstufe) exakt, was sich jedoch nicht erreichen lässt. Die CCM- $LSUBn$ -Resultate sind für die Grundzustandsenergie oft schon sehr gut¹⁴, dennoch sind für die Verbesserung der Genauigkeit anderer Größen Gesetzmäßigkeiten interessant, wie sich diese Ergebnisse im Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ verhalten. Gegenwärtig steht noch keine Theorie zur Verfügung, wie die einzelnen $LSUBn$ -Resultate mit n skalieren. Für verschiedene in dieser Arbeit untersuchten physikalischen Größen (z.B. Energie, Magnetisierung,

Näherungsstufen reell sind.

¹³Die Vorgehensweise bei Verwendung nichtkollinearere Modellzustände (vgl. z.B. Kapitel 4) ist ein offenes Problem.

¹⁴Die Ergebnisse hoher $LSUBn$ sind mit den genauesten Ergebnissen anderer Methoden vergleichbar und z.T. besser; siehe auch [15].

Energiegap, Suszeptibilitäten) gibt es hierzu jedoch mittlerweile zahlreiche empirische Anhaltspunkte und auch praktische Erfahrung [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. In dieser Arbeit werden verschiedene Ansätze für eine Extrapolation der *LSUBn*-Resultate verwendet, die im Wesentlichen auf zwei verschiedenen mathematischen Funktionssystemen beruhen¹⁵:

1. “Ansatz mit offenem Exponenten”

Dieser Ansatz geht davon aus, dass der Entwicklung der CCM-Resultate ein Zusammenhang entsprechend (2.59) zugrunde liegt. Bezeichnet man die Werte für die Grundzustandsenergie, die Magnetisierung oder für das Energiegap mit y_i und mit $x_i = \frac{1}{n}$ die *LSUBn*- bzw. *SUBn* – n -Näherungsstufe, so sucht man den besten Fit an die Wertepaare mit der Funktion:

$$y_i = a_0 + a_1 x_i^{a_2} \quad \text{Extrapolation1.} \quad (2.59)$$

Der Wert von a_0 wird dann als der extrapolierte Wert für $n \rightarrow \infty$ angesehen.

2. “polynomialer Ansatz”

Bei Verwendung von diesem Ansatz wird der Entwicklung der CCM-Resultate ein Zusammenhang entsprechend (2.60) zugrunde gelegt.

$$y_i = b_0 + b_1 x_i^1 + b_2 x_i^2 \quad \text{Extrapolation2.} \quad (2.60)$$

Bezeichnet y_i die Grundzustandsenergie, so fittet man y_i über $x_i = \frac{1}{n^2}$ ($n =$ Näherungsstufe). Falls y_i die Magnetisierung, die Suszeptibilität (siehe Kapitel 5 und Kapitel 6) oder das Spingap bezeichnet, so fittet man y_i über $x_i = \frac{1}{n}$. Bei Verwendung dieses Approximationsschemas ist dann b_0 der extrapolierte Wert für $n \rightarrow \infty$.

Allgemein begründen kann man diese Extrapolationsansätze dadurch, dass sie die Ergebnisse für die verschiedenen Näherungsstufen *LSUBn* gut wiedergeben, d.h. die mittleren quadratischen Abweichungen zwischen den extrapolierten Kurven und den einzelnen Resultaten klein sind. Ein weiteres Argument für die Verwendung der Extrapolation (2.60), findet man bei der Betrachtung der extrapolierten Daten der in Kapitel 3 untersuchten puren Modelle (lineare Kette, isotropes Quadratgitter) (siehe Tabellen 3.1, 3.2, 3.3 und 3.4). Dort findet man eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus exakten Rechnungen (Bethe-Ansatz für die lineare $s = \frac{1}{2}$ -Kette) und mit den Ergebnissen anderer, für diese Modelle sehr genauen analytischen (SWT) bzw. numerischen Methoden (QMC, DMRG). Des Weiteren sind in [33] die volle *SUB2*-Approximation und *SUB2*– m -Rechnungen an einem Heisenberg-Antiferromagneten auf einem quadratischen Gitter für den allgemeinen Spin s durchgeführt worden. Es war möglich, die Art und Weise zu ermitteln, wie sich die *SUB2*– m -Resultate mit m entwickeln. Man fand interessanterweise, dass z.B. die Grundzustandsenergie E linear

¹⁵Für die in dieser Arbeit durchgeführten CCM-Rechnungen unter Verwendung des *SUBn* – m -Näherungsschemas werden dieselben Extrapolationsansätze verwendet. In dieser Arbeit werden nur die *SUBn* – m -Resultate für den Spezialfall $n = m$ extrapoliert. Unterschiede zwischen den Näherungsschemata ergeben sich dann nur für $s > \frac{1}{2}$ (vgl. Abschnitt 2.3.2). Spezielle Untersuchungen [32] haben gezeigt, dass für nicht zu großem Spin s die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen in *SUBn* – n deutlich kleiner als für *LSUBn* ist, wobei die Unterschiede zwischen den Ergebnissen oft kleiner als ein Prozent sind.

mit $\frac{1}{m^2}$ und die Magnetisierung linear mit $\frac{1}{m}$ skalieren (vgl. auch [34]). Für die Extrapolation der *LSUBn*-Ergebnisse (man beachte hier die unterschiedliche Bedeutung der Indizes m und n) wurden ebenfalls diese Ansätze zugrunde gelegt und führen somit auch auf (2.60). Demzufolge können diese Betrachtungen ebenfalls als ein Argument für die Verwendung der angegebenen Extrapolation interpretiert werden.

Bei Systemen mit einem Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang erwies sich die Extrapolation mit einem offenen Exponenten (2.59) als vorteilhaft [27, 29, 35], was möglicherweise damit zusammenhängt, dass sich in der Nähe des kritischen Punktes der Exponent durchaus ändern kann. Die Extrapolationen auf der Grundlage eines polynomialen Ansatzes (2.60) führten dagegen oft auf zu große kritische Werte, weil sie die Parameterregion mit magnetischer Fernordnung überschätzen [28, 29, 36, 37]. Untersuchungen des Exponenten (a_2) von (2.59) bei der Extrapolation des Ordnungsparameters (Magnetisierung) zeigen, dass dieser für viele Modelle in der Nähe des Phasenübergangs nahe bei $a_2 = 0.5$ liegt. Eine Extrapolation der Magnetisierung nach (2.59) kann allerdings im kritischen Punkt (Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang) trotz der grundsätzlichen Eignung dieses Extrapolationsansatzes problematisch sein. Es bietet sich dann durchaus an, (wie z.B. in [31]) innerhalb der Extrapolation den Exponenten bei $a_2 = 0.5$ zu fixieren und einen weiteren Term höherer Ordnung in $\frac{1}{n}$ hinzunehmen:

$$M(n) = c_0 + \left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{1}{2}} \left(c_1 + c_2 \frac{1}{n}\right) \quad \text{Extrapolation 3.} \quad (2.61)$$

Speziell für die Extrapolation des Ordnungsparameters wird deshalb in folgenden Kapiteln zusätzlich (2.61) verwendet.

Die Erfahrung zeigt auch, dass die extrapolierten Werte oft besser sind, wenn man die Ergebnisse der niedrigsten sinnvollen Näherungsstufen (*LSUB2* oder *SUB2-2*) nicht mit einbezieht. Offenbar ist die Beschreibung der Physik in diesen Näherungsstufen doch recht ungenau. Eine Bestätigung dieser Aussage findet man auch in den extrapolierten Daten der in Kapitel 3 betrachteten Modelle (siehe Tabellen 3.1, 3.2, 3.3 und 3.4).

2.3.9 Lösungsrezept für Spinsysteme

Dieser Abschnitt beinhaltet eine zusammengefasste Darstellung der durchzuführenden Einzelschritte für CCM-Rechnungen an Spinsystemen.

Diese Schritte sind:

1. Wahl eines geeigneten Modellzustandes $|\Phi\rangle$.
2. Durchführung einer Koordinatentransformation (2.20) für den Modellzustand entsprechend Abschnitt 2.3.1; Einsetzen der Transformationsgleichungen in den Hamilton-Operator des Systems. Man erhält den transformierten Hamilton-Operator H' .
3. Durchführung der Ähnlichkeitstransformation des Hamilton-Operators gemäß Abschnitt 2.3.3.
4. Finden der fundamentalen Konfigurationen unter Berücksichtigung der Näherungsstufe *SUBn-m*; Aufstellen und Lösen der Ket-Gleichung (2.11) sowie Bestimmung der Ket-Korrelationskoeffizienten.

5. Berechnung der Grundzustandsenergie (2.9), der Bra-Korrelationskoeffizienten (2.47) und der Erwartungswerte (2.14).
6. Finden der fundamentalen Konfigurationen unter Berücksichtigung der Näherungsstufe $SUBn-m$ für den angeregten Zustand; Berechnung des Energiegaps (2.55).
7. Extrapolation der Ergebnisse unter Verwendung eines geeigneten Extrapolationsansatzes entsprechend Abschnitt 2.3.8, falls für eine Extrapolation eine ausreichende Anzahl an Näherungsstufen berechnet werden konnte.

Die Schritte 4-6 beinhalten das Aufstellen und Lösen von nichtlinearen bzw. linearen Gleichungssystemen, was in dieser Arbeit mit einem speziellen Computerprogramm [5] gemacht wurde. Mit den so berechneten Koeffizienten lassen sich alle am System messbaren Größen berechnen (2.14). Anzumerken ist noch, dass der Rechenaufwand, die Gleichungssysteme aufzustellen und zu lösen, stark für höhere $LSUBn$ und $(SUBn-m)$ -Approximationen ansteigt. Die Höhe der noch berechenbaren Näherungsordnung richtet sich dabei nach der Leistungsfähigkeit der verwendeten Rechner.

Kapitel 3

Einfache lineare Kette und einfaches Quadratgitter

In diesem Kapitel wird der Heisenberg-Antiferromagnet (HAFM) auf der einfachen linearen Kette und dem einfachen isotropen Quadratgitter betrachtet. Der Quantenspin s kann hierbei die Werte $s = \frac{1}{2}$ oder $s = 1$ annehmen. Ziel dieses Kapitels ist es, für diese Standardmodelle *State-of-the-Art-CCM*-Ergebnisse zu präsentieren und diese mit den besten in der Literatur verfügbaren Daten anderer Methoden zu vergleichen.

Im Fall der linearen Kette existiert mit der Bethe-Lösung [4] für $s = \frac{1}{2}$ ein exaktes Resultat, so dass sich die Genauigkeit der CCM absolut ermitteln lässt. Für den Fall $s = 1$ kann die Vorgehensweise des Bethe-Ansatzes nicht appliziert werden, jedoch fehlt für die mittlerweile akzeptierten numerischen Ergebnisse lediglich ein theoretischer Beweis. Insbesondere die DMRG-Daten [42] können hier als sehr genau angesehen werden. Die Abweichung vom exakten Wert, z.B. für die Grundzustandsenergie, wird mit $\pm 4 \cdot 10^{-13}$ abgeschätzt. Für die Magnetisierung und für das Spingap sind die Fehler-toleranzen immerhin noch in der Größenordnung $\pm 10^{-10}$. Für den Antiferromagneten auf dem Quadratgitter gibt es ebenfalls keine exakte Lösung, dennoch wurde dieses Modell mit zahlreichen Methoden analytisch und numerisch untersucht. Das Grundzustandsverhalten des Heisenberg-Modells auf dem Quadratgitter gilt als gesichert und die CCM-Ergebnisse können mit den Resultaten der anderen Methoden verglichen werden¹. Weitere Informationen zu beiden Spinsystemen enthält auch das Kapitel 4, wo der Einfluss einer Zwischenkettenkopplung beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen an (frustrierten) gekoppelten Spinketten untersucht wird.

Im Kapitel 2 wurde festgestellt, dass die erreichbare Genauigkeit der CCM von der höchsten noch berechenbaren Näherungsstufe und von der Verwendung einer geeigneten Extrapolation abhängig ist. Die Güte der Extrapolation profitiert von der zunehmenden Erfahrung bei der Anwendung der CCM zur Berechnung von Erwartungswerten an Quantenspinsystemen. Da sich für die hier betrachteten einfachen Modellsysteme die Berechnungen bis zu sehr hohen Näherungsstufen durchführen lassen (lineare Kette bis *LSUB18* ($s = \frac{1}{2}$) bzw. *SUB14-14* ($s = 1$), Quadratgitter bis *LSUB12* ($s = \frac{1}{2}$) bzw. *SUB10-10* ($s = 1$)), stehen zur Extrapolation ausreichend viele Datenpunkte zur Verfügung. Die hier durchgeführten Untersuchungen geben zum einen über die Eignung der spezifischen Extrapolationen Aufschluss und die Abweichungen zwischen den extrapolierten Werten können zum anderen als Toleranz in der Genauigkeit der CCM

¹Eine gute Übersicht findet man in [1] und den darin enthaltenen Referenzen.

interpretiert werden. Die Höhe der erreichbaren Näherungsstufe selbst wird im Wesentlichen durch die Leistungsfähigkeit der verfügbaren Computersysteme und durch das verwendete numerische Programmpaket bestimmt. Letzteres wurde in den vergangenen Jahren erheblich optimiert und für moderne Parallelrechner adaptiert. Mittlerweile lassen sich zahlreiche Erwartungswerte auch für sehr komplexe Spinsysteme berechnen. Je nach Modell kann die Parallelisierung bis zu einigen 10^4 CPU nahezu optimal sein. In praktischen Anwendungen wurde die Näherungsstufe letztendlich durch den zur Verfügung stehenden Hauptspeicher limitiert.

Einen Überblick über die Programmstruktur, die Berechnungsmöglichkeiten physikalischer Größen, den Speicherverbrauch und über das Skalierungsverhalten bei Multiprozessorsystemen findet man im Anhang A. Dort wird auch kurz auf offene Problemstellungen und numerische Schwierigkeiten hingewiesen und ein Ausblick auf zukünftige Erweiterungsmöglichkeiten gegeben.

Zur besseren Übersicht werden die Ergebnisse hier tabellarisch aufgelistet. Für die vier Heisenberg-Antiferromagneten (Kette und Quadratgitter mit jeweils $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$) wurden hierbei die Grundzustandsenergie E , die Untergittermagnetisierung M , die niedrigste Anregungsenergie ϵ^2 , die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grund- und Anregungszustand N_f , N_f^ξ , die Anzahl der Terme in den Ket-Gleichungen N_T , N_T^ξ und der ungefähre Speicherverbrauch RAM^3 in den jeweiligen Näherungsstufen $SUBn-n$ eingetragen. Darüber hinaus wurden die Grundzustandsenergie E , die Untergittermagnetisierung M und die niedrigste Anregungsenergie ϵ nach (2.59) und (2.60) extrapoliert. Für die Magnetisierung M wurde eine zusätzliche Extrapolation nach (2.61) durchgeführt. Die Extrapolationsergebnisse sind ebenfalls in den entsprechenden Tabellen zu finden. Zuzüglich zu den CCM-Ergebnissen wurden Vergleichsdaten anderer Vielteilchen-Methoden eingetragen. Für alle hier untersuchten Modelle wurde der Néel-Zustand als CCM-Modellzustand verwendet.

3.1 Spin- $\frac{1}{2}$ - und Spin-1-HAFM auf der linearen Kette

Eine detaillierte Diskussion eindimensionaler Spinsysteme findet man in [38] und den dort enthaltenen Referenzen. Hier sollen lediglich kurz zu Auswertungszwecken die wesentlichen Eigenschaften beschrieben werden.

Beide hier untersuchten eindimensionalen Heisenberg-Antiferromagnete besitzen keinen ferngeordneten Grundzustand. Von feldtheoretischen Untersuchungen her ist bekannt, dass für eindimensionale Spinsysteme die Korrelationsfunktionen für ganzzahligen Spin s exponentiell und für halbzahligen Spin s algebraisch abfallen. Demnach lassen Quantenfluktuationen auch bei $T = 0$ bei eindimensionalen Systemen keine Néel-Ordnung zu, jedoch ist $T = 0$ für halbzahligen Spin s gerade der kritische Punkt. Daraus schlussfolgert man, dass der Grundzustand für Ketten mit halbzahligem Spin näher an der Néel-Ordnung liegt, als für solche mit ganzzahligem Spin. Ein weiterer Un-

²Die Erweiterungen des CCM-Programmcodes [5] zur Bestimmung des Spingaps wurden von D.J.J. Farnell erst gegen Ende der Fertigstellung dieser Arbeit programmiert. Die hier durchgeführten Berechnungen führen auf z.T. noch unpublizierte Resultate. Zur Validierung der Daten wurden diese mit Ergebnissen analytischer und anderer numerischer Berechnungen verglichen.

³Bei der Angabe des Speicherverbrauchs wird der IEC-Empfehlung von 1996 gefolgt und die Zehnerpotenz verwendet, d.h. z.B. 1kB=1000B.

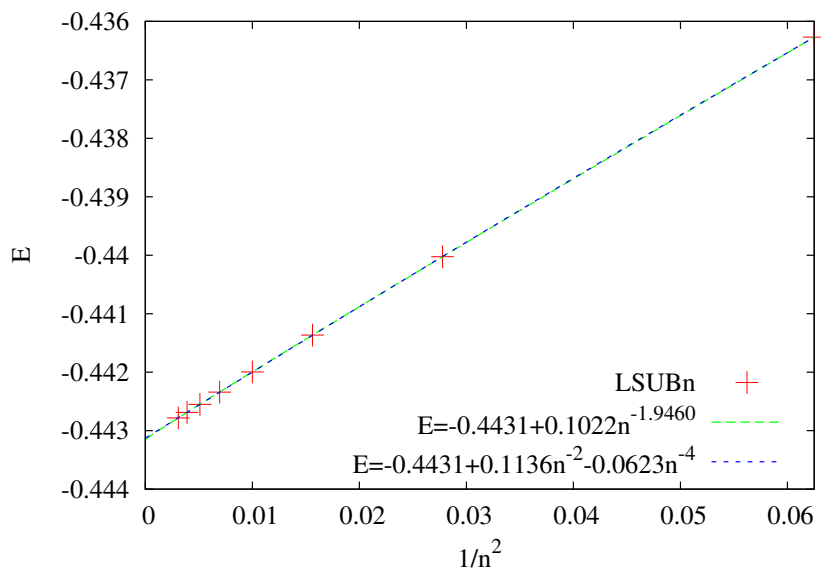


Abbildung 3.1: Darstellung der Extrapolation1 (2.59) und der Extrapolation2 (2.60) für die Grundzustandsenergie der Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette unter Verwendung der *LSUB4-LSUB18*-Daten. Man beachte, dass beide Kurven nahezu identisch sind. Für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ erwartet man $E \sim \frac{1}{n^2}$. Die Skalierung der n -Achse wurde entsprechend dieser Erwartungshaltung gewählt.

terschied zwischen $s = \frac{1}{2}$ - und $s = 1$ -Spinketten zeigte sich auch bei der Untersuchung der niedrigsten Anregungen. Für Ketten mit halbzahligem Spin sind die Spinanregungen gaplos, während es für solche mit ganzzahligem Spin ein Spingap (damit ist hier die Lücke zwischen der Energie des Singulett-Zustandes und der Energie des Triplett-Anregungszustandes gemeint) gibt. Die Größe des sogenannten Haldane-Gaps beträgt hierbei $\approx 0.4105J$ [1, 39].

Die Ergebnisse aus den einzelnen Näherungsstufen, die extrapolierten CCM-Resultate sowie Vergleichsresultate anderer Methoden (nur für $s = 1$) sind in den Tabellen 3.1 ($s = \frac{1}{2}$) und 3.2 ($s = 1$) eingetragen. Betrachtet man nun die gefundenen CCM-Resultate für die Grundzustandsenergie E beider Spinketten, so findet man in den CCM-*SUBn-n*-Daten mit zunehmender Näherungsstufe *SUBn-n* bereits eine gute Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis (für $s = \frac{1}{2}$) bzw. mit den Ergebnissen anderer Methoden (für $s = 1$)⁴. Nach einer passenden Extrapolation ist diese Übereinstimmung sehr gut. In Abbildung 3.1 sind die Extrapolationen nach (2.59) und (2.60) auf der Grundlage der *LSUB4-LSUB18*-Daten für $s = \frac{1}{2}$ graphisch dargestellt. Für das asymptotische Verhalten $n \rightarrow \infty$ erwartet man $E \sim \frac{1}{n^2}$, weswegen die Skalierung der n -Achse in Abbildung 3.1 entsprechend dieser Erwartungshaltung gewählt wurde. Die Funktionsgleichungen zu den Extrapolationen wurden ebenfalls angegeben. Man erkennt an der nach (2.59) extrapolierten Funktion, dass der offene Exponent durch die Anpassung an die Datenpunkte nahe beim erwarteten Wert (-2) liegt. An den Koeffizienten der nach (2.60) extrapolierten Funktion erkennt man ebenfalls die starke Dominanz des quadratischen Terms. An den extrapolierten Daten für $s = \frac{1}{2}$

⁴Es sei hier daran erinnert, dass für $s = \frac{1}{2}$ die Näherungsschemata *SUBn-n* und *LSUBn* identisch sind. Im Folgenden werden bei Betrachtung von $s = \frac{1}{2}$ -Systemen beide Ausdrücke synonym verwendet.

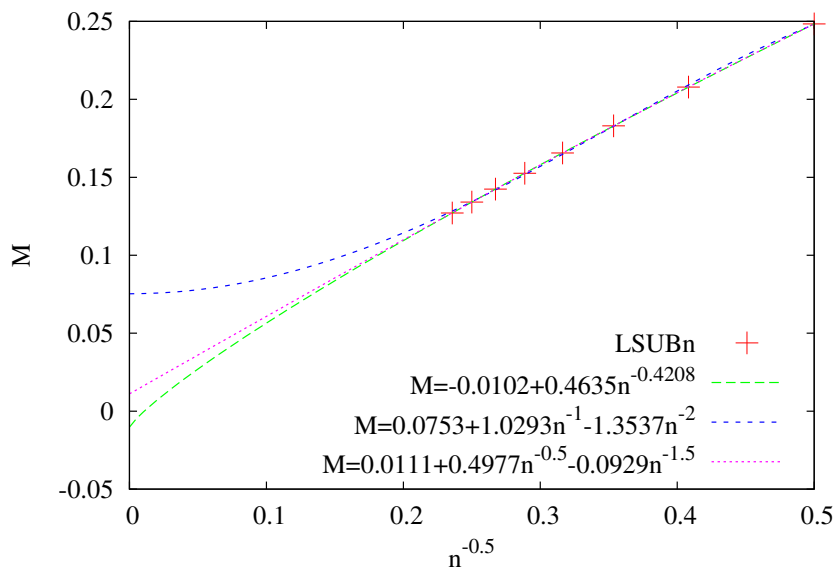


Abbildung 3.2: Darstellung der Extrapolation1 (2.59), der Extrapolation2 (2.60) und der Extrapolation3 (2.61) für die Magnetisierung der Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette unter Verwendung der *LSUB4-LSUB18*-Daten. Für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ erwartet man $M \sim \frac{1}{\sqrt{n}}$. Die Skalierung der n -Achse wurde entsprechend dieser Erwartungshaltung gewählt.

und für $s = 1$ erkennt man auch, dass alle hier zum Vergleich verwendeten Extrapolationsansätze für die Grundzustandsenergie gute Ergebnisse liefern, obgleich die Abweichungen zwischen den extrapolierten Ergebnissen im Falle der $s = 1$ -Kette etwas größer sind. Für die Untergittermagnetisierung beider Ketten erwartet man den Wert $M = 0$, was von den *CCM-SUBn-n*-Daten relativ schlecht wiedergegeben wird. Sind die Abweichungen in den niedrigsten Näherungsstufen noch beträchtlich, so erkennt man zumindest eine starke Abnahme der Magnetisierung M mit Zunahme der Näherungsstufe *SUBn-n*. Gute Übereinstimmung der Magnetisierung M mit dem erwarteten Wert $M = 0$ erhält man nach einer entsprechenden Extrapolation zumindest für $s = \frac{1}{2}$. In Abbildung 3.2 sind die Extrapolationen nach (2.59), (2.60) und (2.61) auf der Grundlage der *LSUB4-LSUB18*-Daten für $s = \frac{1}{2}$ graphisch dargestellt. Für das asymptotische Verhalten $n \rightarrow \infty$ der Magnetisierung erwartet man $M \sim \frac{1}{\sqrt{n}}$. Die Skalierung der n -Achse in Abbildung 3.2 wurde entsprechend dieser Erwartung gewählt. Analog zur Grundzustandsenergie wurden die Funktionsgleichungen zu den Extrapolationen ebenfalls angegeben. Man erkennt an der nach (2.59) extrapolierten Funktion, dass der offene Exponent durch die Extrapolation der Datenpunkte nahe beim erwarteten Wert (-0.5) liegt. An der nach (2.61) extrapolierten Funktion erkennt man an den Koeffizienten ebenfalls die starke Dominanz des Wurzelterms. Man stellt ebenfalls fest, dass die Extrapolation (2.59) hierbei (relativ gesehen) das schlechteste Resultate liefert, da der dominierende Term der Ordnung $\frac{1}{n}$ ist, man allerdings ein Verhalten entsprechend $\frac{1}{\sqrt{n}}$ für $n \rightarrow \infty$ erwartet. Die Extrapolationen nach (2.59) und (2.61) im direkten Vergleich zueinander sind auch in Abbildung 4.20 im Abschnitt 4.4 dargestellt. Negative Werte für M sind hierbei als starker Hinweis auf $M = 0$ zu interpretieren. Das erwartete Resultat $M = 0$ wird von den Extrapolationen für die $s = 1$ -Kette im direkten Vergleich zur $s = \frac{1}{2}$ -Kette weniger deutlich bestimmt. Zunächst erkennt man

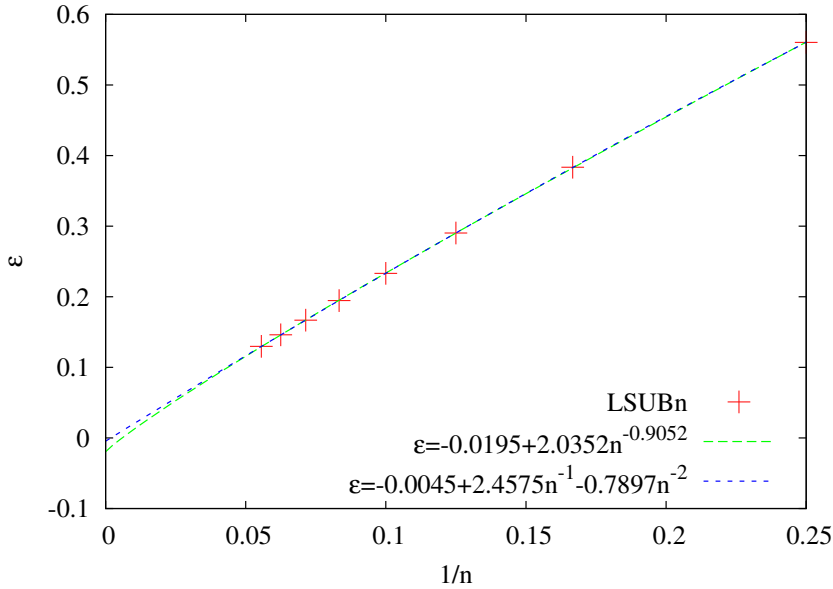


Abbildung 3.3: Darstellung der Extrapolation1 (2.59) und der Extrapolation2 (2.60) für das Spingap der Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette unter Verwendung der *LSUB4-LSUB18*-Daten. Für den Grenzfall $n \rightarrow \infty$ erwartet man $\epsilon \sim \frac{1}{n}$. Die Skalierung der n -Achse wurde entsprechend dieser Erwartungshaltung gewählt.

an den Extrapolation2-Daten eine Bestätigung der Aussage, dass die Ergebnisse ohne Einbeziehung des Wertes der niedrigsten Näherungsstufe besser sind. Die Ergebnisse der Extrapolation1 liefern betragsmäßig große negative und damit sehr unphysikalische Werte für M und wurden ausgelassen. Die für die Extrapolation der Magnetisierung spezialisierte Extrapolation3 liefert dagegen betragsmäßig kleine negative Werte, die hier als einen Hinweis auf $M = 0$ interpretiert werden können. Insgesamt ist dennoch offenbar die Magnetisierung der $s = 1$ -Kette durch Extrapolation schwieriger zu ermitteln. Ursache hierfür sind die unterschiedlichen Eigenschaften beider Systeme. Für die $s = \frac{1}{2}$ -Kette ist der verwendete Modellzustand (Néel-Zustand) offensichtlich besser geeignet, da diese zwar nicht fernegeordnet ist, sich für $T = 0$ aber gerade im kritischen Punkt befindet. Die $s = 1$ -Kette befindet sich nicht im kritischen Punkt, sondern weit in der ungeordneten Phase. Im Abschnitt 4.4 wird z.B. gezeigt, dass für dieses System im Gegensatz zum $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter eine endliche Zwischenkettenkopplung zum zweidimensionalen Gitter für Fernordnung notwendig ist. Dies kann auch als Grund angesehen werden, weswegen auch die Grundzustandsenergie für $s = \frac{1}{2}$ genauer bestimmt wurde.

Unterschiedliches Verhalten beider Ketten wird nun bei der Bestimmung des Spingaps erwartet. Für $s = \frac{1}{2}$ erwartet man den Wert $\epsilon = 0$ und für $s = 1$ den Wert $\epsilon \approx 0.41$ (Haldane-Gap, $J \equiv 1$), welche durch die *CCM-SUBn-n*-Daten, wie im Fall der Magnetisierung M , nur unzureichend wiedergegeben werden. Eine Darstellung der Extrapolationen nach (2.59) und (2.60) auf der Grundlage der *LSUB4-LSUB18*-Daten für das Spingap der $s = \frac{1}{2}$ -Kette zeigt Abbildung 3.3. Für das Spingap erwartet man als asymptotisches Verhalten $n \rightarrow \infty$ den Zusammenhang $\epsilon \sim \frac{1}{n}$. Die Skalierung der n -Achse in Abbildung 3.3 wurde dementsprechend gewählt. Man erkennt an der nach (2.59) extrapolierten Funktion, dass der offene Exponent durch die Anpassung an die

Datenpunkte zum Spingap nahe beim erwarteten Wert (-1) liegt. An der nach (2.60) extrapolierten Funktion erkennt man an den Koeffizienten ebenfalls die starke Dominanz des linearen Terms. Alle Extrapolationen der $s = \frac{1}{2}$ -Kette liefern Werte für das Spingap, die sehr Nahe bei Null liegen und bestätigen die Erwartungen.

Das Haldane-Gap der $s = 1$ -Kette kann durch keine der hier verwendeten Extrapolationen quantitativ wiedergegeben werden. Unter den angegebenen Extrapolationen ist die Extrapolation² für eine Extrapolation des Spingaps am besten begründet. Diese Extrapolation liefert gerade etwa die Hälfte des Spingaps. Als Ursache ist hier ebenfalls, wie bei der Magnetisierung, die Wahl des Modellzustandes zu nennen. Mit diesem werden Anregungen über den, ohnehin selbst schon ungenau beschriebenen, Grundzustand ermittelt. Dennoch ist positiv festzuhalten, dass die CCM ein endliches Spingap für die $s = 1$ -Kette findet und damit zumindest qualitativ korrekt ist.

Zwar gibt eine Betrachtung der CCM- $SUBn-n$ -Daten Anlass zur Vermutung, dass sich die Ergebnisse aus noch höheren Näherungsstufen $SUBn-n$ in der Nähe von $\epsilon = 0.4$ befinden werden, dennoch muss hier als Fazit festgehalten werden, dass die CCM mit dem Néel-Zustand als Modellzustand im Rahmen der hier durchgeführten Untersuchungen keine genaue quantitative Aussage zum Spingap liefern kann.

In den Tabellen 3.1 ($s = \frac{1}{2}$) und 3.2 ($s = 1$) wurde die Zahl der fundamentalen Konfigurationen für die jeweils nächsthöhere Näherungsstufe berechnet. Auf der Grundlage der Werte der darunterliegenden Näherungsstufen wurden die Termzahlen der Gleichungssysteme und der Speicherverbrauch für die Speicherung dieser Terme abgeschätzt. Die Vorgehensweise bei dieser Abschätzung wird im Anhang A.2 beschrieben. Die auf diese Weise ermittelten Größen spiegeln den kumulierten Ressourcenbedarf weitergehender Berechnungen wider.

3.2 Spin- $\frac{1}{2}$ - und Spin-1-HAFM auf dem Quadratgitter

Eine detaillierte Diskussion zweidimensionaler Spinsysteme findet man in [1] und den dort enthaltenen Referenzen. Erneut sollen nun lediglich kurz zu Auswertungszwecken die wesentlichen Eigenschaften des $s = \frac{1}{2}$ - und des $s = 1$ -Quadratgitters beschrieben werden.

Obwohl es für einen langreichweitig geordneten Grundzustand des $s = \frac{1}{2}$ -Antiferromagneten auf dem Quadratgitter keinen expliziten Beweis gibt, gilt diese Annahme aus zahlreichen numerischen Untersuchungen heraus jedoch als gesichert. Quantenfluktuationen beeinflussen dennoch den Grundzustand und führen zu einer Reduktion des klassischen Ordnungsparameters auf etwa 60% [1]. Der Grundzustand beider Gitter ($s = \frac{1}{2}$, $s = 1$)⁵ besitzt des Weiteren kein Spingap (im thermodynamischen Limes) [1]. Die Ergebnisse aus den einzelnen Näherungsstufen, die extrapolierten CCM-Resultate sowie einige verfügbare Vergleichsresultate anderer Methoden sind in den Tabellen 3.3 ($s = \frac{1}{2}$) und 3.4 ($s = 1$) eingetragen. Die CCM-Resultate für die Grundzustandsenergie E beider Quadratgitter konvergieren bereits in den CCM- $SUBn-n$ -Daten mit zunehmender Näherungsstufe $SUBn-n$ recht schnell. Eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Methoden erhält man nach einer Extrapolation. Für die

⁵Das Haldane-Gap der Spin-1-Ketten beginnt sich bei Hinzunahme einer Zwischenkettenkopplung zu schließen und ist Null bei $J_{\perp} \gtrsim 0.06$ [40].

Untergittermagnetisierung erwartet man von $M = 0$ verschiedene Werte, da sowohl das $s = \frac{1}{2}$ - als auch das $s = 1$ -Quadratgitter einen ferngeordneten Grundzustand besitzen. Die CCM- $SUBn-n$ -Daten sind hier jedoch als relativ ungenau zu betrachten. Gute Übereinstimmung der Magnetisierung M mit den Ergebnissen anderer Methoden erhält man ebenfalls nach einer entsprechenden Extrapolation. Erneut zeigt sich, dass die extrapolierten Werte für das $s = 1$ -Quadratgitter ungenauer sind, was hier jedoch auf die kleinere Zahl an CCM- $SUBn-n$ -Datenpunkten zurückzuführen ist. Wertet man die Abweichungen zwischen den Extrapolationen als methodischen Fehler, so sind auch hier nennenswerte Abweichungen zu verzeichnen. Insgesamt kann man die Resultate der CCM im Vergleich zu den Ergebnissen anderer Methoden jedoch als genau bezeichnen. War das zu erwartende Verhalten des $s = \frac{1}{2}$ - und des $s = 1$ -Quadratgitters in Bezug auf das Spingap verschieden, so sollten für beide Gitter die Werte für das Gap verschwinden. Dies wird, wie bei der Magnetisierung, durch die CCM- $SUBn-n$ -Daten nur unzureichend wiedergegeben. Man erkennt jedoch eine signifikante Abnahme der Größe des Gaps mit zunehmender Näherungsstufe. Interpretiert man wiederum kleine negative Werte für das Spingap als einen Hinweis auf $\epsilon = 0$, so stimmen die extrapolierten Werte gut mit den Erwartungen überein. Die Extrapolation (2.59) liefert für das Energiegap des $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitters sehr unphysikalische Werte. Sie wurden in Tabelle 3.3 deshalb nicht eingetragen.

In den Tabellen 3.3 ($s = \frac{1}{2}$) und 3.4 ($s = 1$) wurden, wie für die eindimensionalen Modelle, die Zahl der fundamentalen Konfigurationen für die jeweils nächsthöhere Näherungsstufe berechnet. Auf der Grundlage der Werte der darunterliegenden Näherungsstufen wurden die Termzahlen der Gleichungssysteme und der Speicherverbrauch für die Speicherung dieser Terme abgeschätzt. Die Vorgehensweise bei dieser Abschätzung wird ebenfalls im Anhang A.2 beschrieben. Die auf diese Weise ermittelten Größen spiegeln den kumulierten Ressourcenbedarf weitergehender Berechnungen an diesen zweidimensionalen Modellen wider.

Tabelle 3.1: HAFM auf der linearen $s = \frac{1}{2}$ -Kette: Grundzustandsenergie E , Untergittermagnetisierung M , niedrigste Anregungsenergie ϵ , Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grund- und Anregungszustand N_f , N_f^ϵ , Anzahl der Terme in den Ket-Gleichungen N_T , N_T^ϵ und der Speicherverbrauch RAM in den jeweiligen Näherungsstufen. Zu Vergleichszwecken wurde die Zahl der fundamentalen Konfigurationen, die kumulierte Termzahl und der kumulierte Speicherbedarf der folgenden (nicht mehr berechneten) Näherungsstufe angegeben. Die Ergebnisse aus den Extrapolationen ((2.59) (Extrapolation1) und (2.60) (Extrapolation2) für E , M und ϵ , (2.61) (Extrapolation3) für M) für die lineare $s = \frac{1}{2}$ -Kette sind eingetragen. Die in Klammern angegebenen Zahlen geben hierbei die zur Extrapolation verwendeten Näherungsstufen an. Zum Vergleich wurde das exakte Resultat ebenfalls eingetragen.

Näherungsstufe	N_f	E	M	N_T	RAM	N_f^ϵ	ϵ	N_T^ϵ	RAM
$SUB2-2$	1	-0.41666666	0.33333333	7	224B	1	1.00000000	2	64B
$SUB4-4$	3	-0.43626964	0.24838810	22	704B	3	0.56039953	23	736B
$SUB6-6$	9	-0.44002442	0.20788535	131	4.19kB	9	0.38345921	258	7.93kB
$SUB8-8$	26	-0.44136565	0.18297154	1149	37kB	31	0.29025083	3445	110kB
$SUB10-10$	81	-0.44199505	0.16562441	13147	420kB	110	0.23309749	49808	1.6MB
$SUB12-12$	267	-0.44234049	0.15262698	181887	5.8MB	406	0.19457664	808641	26MB
$SUB14-14$	931	-0.44255049	0.14240498	2943289	94MB	1519	0.16689332	14679472	470MB
$SUB16-16$	3362	-0.44268771	0.13408401	53752098	1.7GB	5755	0.14605542	291887052	9.3GB
$SUB18-18$	12445	-0.44278234	0.12713385	$1 \cdot 10^9$	32GB	21942	0.12981197	$6 \cdot 10^9$	192GB
$SUB20-20$	46764	-	-	$\approx 20 \cdot 10^9$	$\approx 640GB$	84106	-	$\approx 120 \cdot 10^9$	$\approx 3.8TB$
Extrapolation1 (2-18)	-	-0.443153	-0.020316	-	-	-	-0.061900	-	-
Extrapolation1 (4-18)	-	-0.443151	-0.010245	-	-	-	-0.019510	-	-
Extrapolation2 (2-18)	-	-0.443111	0.086304	-	-	-	-0.008124	-	-
Extrapolation2 (4-18)	-	-0.443129	0.075318	-	-	-	-0.004526	-	-
Extrapolation3 (2-18)	-	-	0.012785	-	-	-	-	-	-
Extrapolation3 (4-18)	-	-	0.011126	-	-	-	-	-	-
exakt (Bethe-Ansatz)	-	-0.443147	0.0	-	-	-	0.0	-	-

Tabelle 3.2: HAFM auf der linearen $s = 1$ -Kette: Grundzustandsenergie E , Untergittermagnetisierung M , niedrigste Anregungsenergie ϵ , Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grund- und Anregungszustand N_f , N_f^ϵ , Anzahl der Terme in den Ket-Gleichungen N_T , N_T^ϵ und der Speicherverbrauch RAM in den jeweiligen Näherungsstufen. Zu Vergleichszwecken wurde die Zahl der fundamentalen Konfigurationen, die kumulierte Termzahl und der kumulierte Speicherbedarf der folgenden (nicht mehr berechneten) Näherungsstufen angegeben. Die Ergebnisse aus den Extrapolationen ((2.59) (Extrapolation1) und (2.60) (Extrapolation2) für E , M und ϵ , (2.61) (Extrapolation3) für M) für die lineare $s = 1$ -Kette sind eingetragen. Die in Klammern angegebenen Zahlen geben hierbei die zur Extrapolation verwendeten Näherungsstufen an. Vergleichsresultate anderer Methoden wurden ebenfalls eingetragen.

Näherungsstufe	N_f	E	M	N_T	RAM	N_f^ϵ	ϵ	N_T^ϵ	RAM
<i>SUB</i> 2-2	1	-1.31662479	0.80906807	5	160B	1	1.36675042	2	64B
<i>SUB</i> 4-4	7	-1.36008435	0.69461048	56	1.7kB	5	0.91462609	43	1.4kB
<i>SUB</i> 6-6	37	-1.37560662	0.60733918	1372	44kB	35	0.68253667	1905	61kB
<i>SUB</i> 8-8	247	-1.38346552	0.53325176	51447	1.6MB	284	0.56113923	86658	2.8MB
<i>SUB</i> 10-10	1811	-1.38821635	0.46660679	2454302	78.5MB	2367	0.49010376	4512266	144.4MB
<i>SUB</i> 12-12	14338	-1.39142566	0.40520813	138301993	4.4GB	19990	0.44756043	265457944	8.5GB
<i>SUB</i> 14-14	117221	-1.39374842	0.34817571	8784510070	281GB	170207	0.42143600	17317761850	550GB
<i>SUB</i> 16-16	977239	-	-	$\approx 50 \cdot 10^9$	$\approx 1.7TB$	1457864	-	$\approx 1.2 \cdot 10^{12}$	$\approx 40TB$
Extrapolation1 (2-14)	-	-1.409453	-	-	-	-	-0.016071	-	-
Extrapolation1 (4-14)	-	-1.408168	-	-	-	-	0.240430	-	-
Extrapolation2 (2-14)	-	-1.395212	0.176511	-	-	-	0.172801	-	-
Extrapolation2 (4-14)	-	-1.398109	0.041688	-	-	-	0.227853	-	-
Extrapolation3 (2-14)	-	-	-0.196117	-	-	-	-	-	-
Extrapolation3 (4-14)	-	-	-0.405329	-	-	-	-	-	-
3.-Ordnung SWT [41]	-	-1.3634	-	-	-	-	-	-	-
DMRG [42]	-	-1.401484	-	-	-	-	0.4105	-	-
QMC [43]	-	-1.402	≈ 0	-	-	-	0.414	-	-

Tabelle 3.3: HAFM auf dem $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter: Grundzustandsenergie E , Untergittermagnetisierung M , niedrigste Anregungsenergie ϵ , Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grund- und Anregungszustand N_f , N_f^ϵ , Anzahl der Terme in den Ket-Gleichungen N_T , N_T^ϵ und der Speicherverbrauch RAM in den jeweiligen Näherungsstufen. Zu Vergleichszwecken wurde die Zahl der fundamentalen Konfigurationen, die kumulierte Termzahl und der kumulierte Speicherbedarf der folgenden (nicht mehr berechneten) Näherungsstufen angegeben. Die Ergebnisse aus den Extrapolationen ((2.59) (Extrapolation1) und (2.60) (Extrapolation2) für E , M und ϵ , (2.61) (Extrapolation3) für M) für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter sind eingetragen. Die in Klammern angegebenen Zahlen geben hierbei die zur Extrapolation verwendeten Näherungsstufen an. Vergleichsresultate anderer Methoden wurden ebenfalls eingetragen.

Näherungsstufe	N_f	E	M	N_T	RAM	N_f^ϵ	ϵ	N_T^ϵ	RAM
<i>SUB</i> 2-2	1	-0.64833148	0.42071349	5	160B	1	1.40667409	2	64B
<i>SUB</i> 4-4	7	-0.66366391	0.38239776	74	2.4kB	6	0.85186760	93	3kB
<i>SUB</i> 6-6	75	-0.66700060	0.36364084	8353	267kB	91	0.60965762	20875	668kB
<i>SUB</i> 8-8	1287	-0.66817399	0.35241737	1121976	36MB	2011	0.47270816	3470188	111MB
<i>SUB</i> 10-10	29605	-0.66870253	0.34483273	142743546	4.6GB	51012	0.38448329	507592921	16.2GB
<i>SUB</i> 12-12	766220	-0.66897809	0.33929479	$19.34 \cdot 10^9$	619GB	1374389	0.32293506	$75.9 \cdot 10^9$	2.43TB
<i>SUB</i> 14-14	20922484	-	-	$\approx 2.5 \cdot 10^{12}$	$\approx 80TB$	38296324	-	$\approx 11 \cdot 10^{12}$	$\approx 350TB$
Extrapolation1 (2-12)	-	-0.669887	0.262545	-	-	-	-	-	-
Extrapolation1 (4-12)	-	-0.669627	0.282318	-	-	-	-	-	-
Extrapolation2 (2-12)	-	-0.669700	0.312943	-	-	-	0.012865	-	-
Extrapolation2 (4-12)	-	-0.669642	0.309311	-	-	-	-0.008569	-	-
Extrapolation3 (2-12)	-	-	0.277082	-	-	-	-	-	-
Extrapolation3 (4-12)	-	-	0.280967	-	-	-	-	-	-
Lineare SWT [41]	-	-0.65795	0.3034	-	-	-	0.0	-	-
2.-Ordnung SWT [44]	-	-0.67042	0.3034	-	-	-	0.0	-	-
3.-Ordnung SWT [45]	-	-0.66999	0.3069	-	-	-	0.0	-	-
Reihenwt. [46]	-	-0.6693(1)	0.307(1)	-	-	-	-	-	-
QMC [47]	-	-0.669437(5)	0.3070(3)	-	-	-	-	-	-
ED [1]	-	-0.6701	0.3173	-	-	-	0.0605	-	-

Tabelle 3.4: HAFM auf dem $s = 1$ -Quadratgitter: Grundzustandsenergie E , Untergittermagnetisierung M , niedrigste Anregungsenergie ϵ , Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grund- und Anregungszustand N_f , N_f^ϵ , Anzahl der Terme in den Ket-Gleichungen N_T , N_T^ϵ und der Speicherverbrauch RAM in den jeweiligen Näherungsstufen. Zu Vergleichszwecken wurde die Zahl der fundamentalen Konfigurationen, die kumulierte Termzahl und der kumulierte Speicherbedarf der folgenden (nicht mehr berechneten) Näherungsstufen angegeben. Die Ergebnisse aus den Extrapolationen ((2.59) (Extrapolation1) und (2.60) (Extrapolation2) für E , M und ϵ , (2.61) (Extrapolation3) für M) für das $s = 1$ -Quadratgitter sind eingetragen. Die in Klammern angegebenen Zahlen geben hierbei die zur Extrapolation verwendeten Näherungsstufen an. Vergleichsresultate anderer Methoden wurden ebenfalls eingetragen.

Näherungsstufe	N_f	E	M	N_T	RAM	N_f^ϵ	ϵ	N_T^ϵ	RAM
<i>SUB</i> 2-2	1	-2.29504098	0.91001334	5	160B	1	2.22975410	2	64B
<i>SUB</i> 4-4	15	-2.31975455	0.87119536	240	7.7kB	9	1.33700179	187	5.9kB
<i>SUB</i> 6-6	375	-2.32486336	0.85255916	68695	2.2MB	315	0.93820513	77429	2.5MB
<i>SUB</i> 8-8	17864	-2.32656760	0.84127230	24188958	774MB	16950	0.71298117	29611068	947MB
<i>SUB</i> 10-10	1056286	-2.32725708	0.83384413	$9.1 \cdot 10^9$	291GB	1061668	0.57032873	$11.6 \cdot 10^9$	371GB
<i>SUB</i> 12-12	$\approx 80 \cdot 10^6$	-	-	$\approx 3.5 \cdot 10^{12}$	$\approx 111TB$	$\approx 90 \cdot 10^6$	-	$\approx 4.5 \cdot 10^{12}$	$\approx 145TB$
Extrapolation1 (2-10)	-	-2.328983	0.750939	-	-	-	-0.595823	-	-
Extrapolation1 (4-10)	-	-2.328421	0.770866	-	-	-	-0.297007	-	-
Extrapolation2 (2-10)	-	-2.328821	0.803336	-	-	-	-0.035665	-	-
Extrapolation2 (4-10)	-	-2.328561	0.799424	-	-	-	-0.062769	-	-
Extrapolation3 (2-10)	-	-	0.766010	-	-	-	-	-	-
Extrapolation3 (4-10)	-	-	0.769810	-	-	-	-	-	-
3.-Ordnung SWT[44]	-	-2.32815	0.80427	-	-	-	-	-	-
Reihenentw. [46]	-	-2.3279(2)	0.8039(4)	-	-	-	-	-	-

Kapitel 4

Das quasi-eindimensionale J_1 - J_2 -Modell

In den vergangenen Jahren waren niederdimensionale frustrierte Quantenmagnete Gegenstand intensiver theoretischer und experimenteller Forschung; zum einen als Modelle zum Studium des Einflusses von Quantenfluktuationen und Frustration auf die magnetische Ordnung im Grundzustand ($T = 0$) und zum anderen wegen der reichhaltigen Phasendiagramme und der interessanten Physik, die in diesen Systemen zu finden ist [1, 38, 39].

In diesem Kapitel liegt das Hauptaugenmerk besonders auf drei Spezialfällen des betrachteten Quantenspinsystems, welche mit der Wahl des entsprechenden CCM-Modellzustandes zusammenhängt. Hierbei wurden auch unterschiedliche Fragestellungen aufgestellt, weswegen diese Fälle zunächst ausführlich motiviert werden sollen.

Frustriertes quasi-1d Quantenspinsystem in *SUB*2-3; Spiral-Zustand

Frustrierte eindimensionale J_1 - J_2 -Heisenberg-Modelle wurden in der Vergangenheit detailliert untersucht (siehe z.B. [38]). Als Realisierungen dieser Systeme sind experimentell insbesondere die sogenannten *edge-shared chain cuprates* interessant, zu welchen unter anderem LiVCuO_4 , LiCu_2O_2 , NaCu_2O_2 , $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ und Li_2CuO_2 gehören [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58]. Von den genannten Materialien sind $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ und Li_2CuO_2 wegen ihrer Nähe zum quantenkritischen Punkt besonders interessant [56, 58]. Das frustrierte eindimensionale J_1 - J_2 -Heisenberg-Modell dient hier als einfachstes Modell zur theoretischen Beschreibung.

Im klassischen Fall findet man einen Phasenübergang zweiter Ordnung von einer kollinearen Phase (ferromagnetisch oder antiferromagnetisch) zu einer Phase mit spiralartigen Korrelationen entlang der J_1 - J_2 -Ketten, charakterisiert durch einen Spiralwinkel α . Im klassischen Fall ist sowohl dieser Winkel, als auch der Phasenübergangspunkt nicht von der Zwischenkettenkopplung J_\perp abhängig. Dennoch wurden z.B. in [59, 60] ein klassischer Zusammenhang zwischen den Spin-Spin-Kopplungen und dem Spiralwinkel verwendet, um die Wahl eindimensionaler Parameter, welche mittels *local-density approximation* (LDA) [59] und durch fitten von $\chi(T)$ -Daten [60] bestimmt wurden, zu rechtfertigen. Da auf diese Weise jedoch relevante Quanteneffekte vernachlässigt werden, ist diese Vorgehensweise nicht sehr überzeugend. In realen Materialien kann jedoch eine weitere Kopplung zwischen den Ketten (über den reinen eindimensionalen Grenzfall hinausgehend) relevant sein. Die Existenz spiralartig geordneter Phasen bei tiefen Temperaturen unterstreicht die Notwendigkeit der Einbeziehung von J_\perp .

Während es zahlreiche Publikationen zum Verhalten des eindimensionalen Systems gibt [61, 62, 63, 64, 65, 66], wurden die um J_{\perp} erweiterten Modelle weit weniger bzw. der Einfluss von J_{\perp} auf den Spiralwinkel im Quantenfall α_{qu} bisher nicht untersucht. Im Abschnitt 4.3 wird deshalb ein frustriertes quasi-eindimensionales (bis hin zum über den quasi-eindimensionalen Fall hinausgehendes zweidimensionales) Spin- $\frac{1}{2}$ -System untersucht. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der Betrachtung des Einflusses der Zwischenkettenkopplung J_{\perp} .

Die theoretische Beschreibung frustrierter Systeme im Allgemeinen ist dabei nicht trivial. Man kann zwar in besonderen Fällen exakte Grundzustände finden (hierzu siehe [61, 67, 68, 69]), dennoch ist die methodische Auswahl durch die Dimension und die Frustration eingeschränkt. Details hierzu wurden ausführlich im Abschnitt 2.2 angegeben. Hier soll deshalb nur eine stichpunktartige Diskussion erfolgen. Die QMC leidet wegen der Frustration unter dem Vorzeichenproblem. Die DMRG konnte zunächst erfolgreich zur Untersuchung spiralartiger Korrelationen in 1d-Systemen verwendet werden [62, 64], ist allerdings derzeit auch auf 1d-Systeme beschränkt. Die ED, welche in [65] zur Untersuchung des Spiralwinkels verwendet wurde, wäre auf sehr kleine Systemgrößen limitiert, wenn eine endliche Zwischenkettenkopplung hinzugenommen wird. Die lineare SWT kann keine Quantenkorrekturen zum klassischen Spiralwinkel liefern¹. Die CCM ist keiner dieser Einschränkungen unterworfen. Der eindimensionale Fall dieses Modells wurde bereits im Rahmen der CCM (zusammen mit der DMRG) untersucht [62]. Die Näherungsstufe wurde dabei auf *SUB2-3* limitiert, dennoch stimmen die gefundenen Ergebnisse gut mit den Resultaten der DMRG überein. Im Abschnitt 4.3 wird die CCM-Näherungsstufe entsprechend der Vorgehensweise in [62] auf *SUB2-3* beschränkt, jedoch wird das zugrundeliegende Modell um eine Zwischenkettenkopplung J_{\perp} erweitert.

Innerhalb dieser Näherungsstufe werden nur Konfigurationen berücksichtigt, die maximal zwei Spins auf einem Gebiet von drei Gitterplätzen beinhalten. *SUB2-3* ist dabei die erste Näherungsstufe, die alle Wechselwirkungen berücksichtigt.

Vorteile dieser Einschränkung ergeben sich im numerischen Aufwand. Dieses Modell beinhaltet zwei echte Parameter (J_2 und J_{\perp}) und zusätzlich kann sich J_1 im Vorzeichen unterscheiden. Für alle Parameterkombinationen sind innerhalb der CCM, lineare sowie nichtlineare Gleichungssysteme aufzustellen und zu lösen. Dieser Aufwand wächst sehr schnell mit der Näherungsstufe und damit auch der Gesamtaufwand bei der Untersuchung eines gegebenen Problems. Des Weiteren kann das Gleichungssystem in *SUB2-3* für alle Parameterwerte geschlossen analytisch bestimmt werden, was in Abschnitt 4.2 ausführlich als Beispielrechnung angegeben wird. Als Nachteil der Beschränkung auf *SUB2-3* ist zu nennen, dass die Möglichkeiten der CCM durch Betrachtung hoher Näherungsstufen und anschließender Extrapolation nicht ausgeschöpft werden können. Die hierzu bestimmten Resultate wurden in [70] publiziert.

Frustriertes quasi-1d Quantenspinsystem; Néel-Zustand

Wichtige Eigenschaften des eindimensionalen Heisenberg-Antiferromagneten wurden bereits im Kapitel 3 genannt. Hier erfolgt erneut eine kurze Auflistung wichtiger Eigenschaften zum Zwecke der besseren Lesbarkeit dieses Abschnittes.

Unabhängig vom Spin s ist der eindimensionale Heisenberg-Antiferromagnet auch im

¹Solche Quantenkorrekturen zum klassischen Spiralwinkel kann man z.B. im Rahmen der Schwinger-Boson Molekularfeld-Theorie durch $1/S$ -Entwicklung erhalten. In [71] wurde ein ähnliches (aber nicht identisches) Modell frustrierter gekoppelter Ketten untersucht.

Grundzustand nicht ferngeordnet. Der eindimensionale Heisenberg-Antiferromagnet mit halbzahligen Spin s besitzt kein Gap zum Anregungsspektrum und weist ein Potenzverhalten der Spin-Spin-Korrelationen mit wachsendem Abstand auf. Bei ganzzahligen Spin gibt es ein endliches Gap (Spingap) zum Anregungsspektrum und einen stärkeren, exponentiellen Abfall der Spin-Spin-Korrelationen [39]. Man fand weiterhin, dass sich auch für den eindimensionalen Heisenberg-Antiferromagneten mit halbzahligen Spin s ein Gap öffnet, wenn eine frustrierende Wechselwirkung zu den übernächsten Nachbarn hinzugenommen wird ($J_1 - J_2$ -Modell; für eine detailliertere Diskussion eindimensionaler Spinsysteme siehe [38]). Für einen langreichweitig geordneten Grundzustand ist der Übergang zu zweidimensionalen Gittern erforderlich. Der Heisenberg-Antiferromagnet auf zweidimensionalen bipartiten Gittern besitzt, unabhängig von s , einen ferngeordneten Grundzustand, lediglich konkurrierende Wechselwirkung kann diese Ordnung zerstören (für eine detailliertere Diskussion von zweidimensionalen Spinsystemen siehe [72, 73]).

In realen Materialien ist man jedoch oft mit der Situation konfrontiert, dass es zusätzlich zu einer dominierenden Nächsten-Nachbar-Wechselwirkung J_1 eine Zwischenkettenkopplung J_\perp gibt. Hierbei scheint es sogar eher die Ausnahme zu sein, dass es sich bei dieser Zwischenkettenkopplung J_\perp um eine nur schwache Kopplung handelt [74]. Interessant wird damit die Untersuchung des Übergangsverhaltens dieser Systeme von einer zu zwei Dimensionen durch Veränderung der Zwischenkettenkopplung. Der quasi-eindimensionale ($J_\perp \ll J_1$) Spin- $\frac{1}{2}$ -HAFM wurde diesbezüglich in den vergangenen Jahren genauer untersucht [75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83], hauptsächlich mit der Fragestellung nach einer kritischen Zwischenkettenkopplung J_\perp^c , oberhalb derer das System Fernordnung aufweist. Die zunächst gefundenen Ergebnisse waren zum Teil widersprüchlich und nicht überzeugend. In [76, 77, 78] fand man Anzeichen für ein endliches J_\perp^c . In [75, 79, 80, 81, 82, 83] fand man $J_\perp^c = 0$, was wegen des fehlenden Anregungsgaps in diesem System plausibler erscheint. Die für diese unfrustrierten Spinsysteme äußerst genaue QMC [79, 82, 83] unterstützt das Ergebnis $J_\perp^c = 0$.

Das Verhalten des entsprechenden Spin-1-HAFM wurde in der Literatur weniger beachtet. Dennoch fand man in verschiedenen Untersuchungen [40, 75, 82, 83, 84, 85] Anzeichen für $J_\perp^c > 0$. In [75] wurde eine untere Grenze für die kritische Zwischenkettenkopplung $J_\perp^c \geq 0.025J_1$ und in [85] eine obere Grenze $J_\perp^c \leq 0.1892J_1$ ermittelt. Aktuellere QMC Ergebnisse [82, 83, 84] ergaben $J_\perp^c \approx 0.043J_1 - 0.044J_1$, was ungefähr 10% des Haldane-Gaps ist.

Um experimentelle Befunde zum Vergleich heranzuziehen, sind demnach Materialien mit einer im Vergleich zu J_1 schwachen Kopplung J_\perp notwendig. Materialien wie Sr_2CuO_3 , Ca_2CuO_3 [86, 87], $Sr_2V_3O_9$ [88], $BaCu_2Si_2O_7$ [89], $Sr_2Cu(PO_4)_2$ und $Ba_2Cu(PO_4)_2$ [90] sind recht gute Realisierungen des Spin- $\frac{1}{2}$ -HAFM mit nicht zu großer Kopplung J_\perp . Hierbei zeigt $Sr_2Cu(PO_4)_2$ das beste quasi-eindimensionale Verhalten [74]. Es weist das kleinste Verhältnis von der Néel-Temperatur T_N zur Kopplung J_1 von $K_B T_N / J_1 \approx 6 \cdot 10^{-4}$ auf. Alle genannten Materialien sind unterhalb T_N langreichweitig geordnet, obwohl die Zwischenkettenkopplungen z. T. bemerkenswert klein sind.

Auf der anderen Seite fand man in entsprechenden Realisierungen von Spin-1-HAFM wie $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ [91, 92] und anderen Ni -Verbindungen (siehe auch [91]) keine langreichweitige Ordnung bei Messungen hin zu tiefsten Temperaturen.

Weitere interessante Fragestellungen am Spin- $\frac{1}{2}$ -HAFM in diesem Zusammenhang treten mit der Hinzunahme einer frustrierenden Übernächsten-Nachbar-Wechselwirkung J_2 auf. Ab $J_2 = 0.2411J_1$ [93] beginnt ein Phasenübergang zu einem dimerisierten

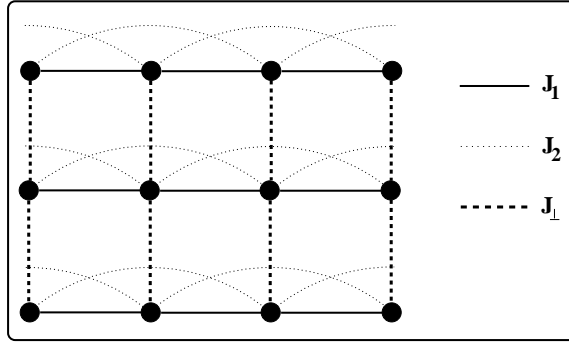


Abbildung 4.1: Illustration des frustrierten Heisenberg-Modells mit J_1 als Nächste-Nachbar- und J_2 als frustrierende Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung und der Zwischenkettenkopplung J_\perp .

Grundzustand mit einem Spingap und die langreichweitigen Spin-Spin-Korrelationen zeigen exponentielles Abklingverhalten. Demzufolge kann das Übergangsverhalten von einer zu zwei Dimensionen auch davon abhängig sein, ob J_2 größer oder kleiner als der kritische Wert von $J_2 = 0.2411J_1$ ist. Anzumerken ist hierbei, dass die Verwendung der QMC durch die Frustration und dem damit zusammenhängenden Vorzeichenproblem (vgl. Abschnitt 2.2) erschwert ist. Die Verwendung der CCM ist demnach auch vom methodischen Standpunkt aus betrachtet interessant. Ein Vergleich der gefundenen Resultate kann also auch weiteren Aufschluss auf die Güte der CCM liefern.

Im Abschnitt 4.4 wird deshalb besonders der Ordnungsparameter M des quasi-eindimensionalen HAFM untersucht (im Fall des frustrierten Systems nur für $s = \frac{1}{2}$). Hierbei sind alle Wechselwirkungen J_1, J_2 und J_\perp antiferromagnetisch. Als CCM-Modellzustand wird der Néel-Zustand verwendet. Die Berechnung erfolgt hin zu hohen Näherungsstufen mit einer sich anschließenden Extrapolation. Die wichtigsten Resultate sind in [94] publiziert².

4.1 Definition des quasi-1d J_1 - J_2 -Modells

Für die Untersuchung der Problemstellungen in diesem Kapitel werden frustrierte J_1 - J_2 -Ketten mittels einer Zwischenkettenkopplung J_\perp zu einem zweidimensionalen Gitter verbunden. Abbildung 4.1 illustriert das betrachtete Quantenspinsystem. Der entsprechende Hamilton-Operator im Rahmen des Heisenberg-Modells lautet:

$$H = \sum_{i,n} J_1 \mathbf{s}_{i,n} \cdot \mathbf{s}_{i+1,n} + J_2 \mathbf{s}_{i,n} \cdot \mathbf{s}_{i+2,n} + J_\perp \mathbf{s}_{i,n} \cdot \mathbf{s}_{i,n+1}. \quad (4.1)$$

Hierbei kennzeichnet der Index n eine spezielle Kette und der Index i einen Gitterplatz innerhalb einer Kette. Für alle an diesem Modell untersuchten Fragestellungen ist die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung J_1 fixiert zu entweder $J_1 = 1$ (antiferromagnetisch)

²Hier wäre ebenfalls die Untersuchung des Spingaps beim 1d-2d Übergang interessant gewesen. Allerdings ließ die Entwicklungsstufe des Programmpaketes [5] zum Zeitpunkt der Untersuchungen keine direkte Berechnung des Spingaps zu. Das Kapitel 3, in dem das Spingap für einfache Modelle berechnet wurde, konnte erst kurz vor Fertigstellung dieser Dissertationsschrift durch Hinzunahme numerischer Werte für das Spingap vervollständigt werden.

oder zu $J_1 = -1$ (ferromagnetisch). Die Zwischenkettenkopplung J_\perp und die frustrierende Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung J_2 sind die Modellparameter. Während J_2 nur im antiferromagnetischen Regime variiert wird ($J_2 \geq 0$), kann J_\perp ebenso auch ferromagnetisch sein ($J_\perp \in [-1, 1]$). Der Quantenspin s kann für die folgenden Betrachtungen (je nach Fragestellung) die Werte $s = \frac{1}{2}$ und $s = 1$ annehmen.

4.2 Ket-Gleichungssystem in $SUB2-3$, nichtkollinerar Modellzustand

In diesem Teil der Arbeit soll das in Abschnitt 2.3.9 angegebene Rezept zum Aufstellen des Ket-Gleichungssystems für $s = \frac{1}{2}$ demonstriert werden. Dieses Gleichungssystem stellt die Grundlage der Betrachtungen für den Abschnitt 4.3 dar. Für die Bearbeitung der in der Einleitung zu diesem Kapitel angegebenen Problemstellungen ist nur das Ket-Gleichungssystem relevant, da z.B. kein Ordnungsparameter untersucht wird und die Bra-Korrelationskoeffizienten für die Grundzustandsenergie nicht erforderlich sind. Alle getroffenen Aussagen werden dem Verhalten der Grundzustandsenergie $E = E(\alpha_{qu}, J_1, J_2, J_\perp)$ entnommen. Spezialfälle des Gleichungssystems ergeben darüber hinaus analytische Gleichungen in derselben Näherungsstufe für die in dem Abschnitt 4.4 betrachteten Modelle. Einige solche, als Spezialfälle gefundenen Gleichungen, können mit hierzu z.T. bereits publizierten Gleichungen verglichen werden.

4.2.1 Der klassische Grundzustand

Das Auffinden des klassischen Grundzustandes reduziert sich im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) darauf, den Grundzustand für ein Untersystem aus vier Spins zu betrachten. Ausgehend von einem Spin \mathbf{s}_i in der Kette n wird jede auftretende Spin-Spin-Wechselwirkung genau einmal berücksichtigt. Die Spins selbst sind hier klassische planare Vektoren. Mit $\mathbf{s}_i = s(\sin \delta_i, \cos \delta_i)$ und mit $\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = s^2 \cos(\delta_j - \delta_i)$ folgt für den zu minimierenden Ausdruck:

$$E_i = J_1 s^2 \cos(\delta_{i+1,n} - \delta_{i,n}) + J_2 s^2 \cos(\delta_{i+2,n} - \delta_{i,n}) + J_\perp s^2 \cos(\delta_{i,n+1} - \delta_{i,n}). \quad (4.2)$$

Je nach Vorzeichen der Kopplung J_\perp entsteht ein minimaler Anteil für parallele bzw. antiparallele Spinausrichtung, so dass $\delta_{i,n+1} - \delta_{i,n} \in \{0, \pi\}$ ist. Mit $\delta_{i+1,n} - \delta_{i,n} = \alpha$, $\delta_{i+2,n} - \delta_{i,n} = 2\alpha$ und mit $s = \frac{1}{2}$ muss nun zum Auffinden des Grundzustandes (4.2) in Bezug auf den Winkel α minimiert werden:

$$0 \stackrel{!}{=} -\frac{J_1}{4} \sin(\alpha_{cl}) - \frac{J_2}{2} \sin(2\alpha_{cl}) \Rightarrow \alpha_{cl} = \arccos\left(\frac{-J_1}{4J_2}\right), \text{ für } J_2 \geq \frac{|J_1|}{4}. \quad (4.3)$$

Bis $J_2 = \frac{|J_1|}{4}$ ist der Grundzustand kollinear (einfacher ferromagnetischer Zustand oder antiferromagnetischer Néel-Zustand), dann findet im klassischen System ein Phasenübergang zweiter Ordnung zu einer Phase mit spiralartigen Korrelationen entlang der J_1 - J_2 -Ketten statt. Eine Illustration kollinearer und nichtkollinearer Spinzustände ist in Abbildung 4.2 zu sehen. Man erkennt, dass im klassischen Fall sowohl der Winkel α_{cl} , als auch der Phasenübergangspunkt nicht von der Zwischenkettenkopplung J_\perp abhängig sind.

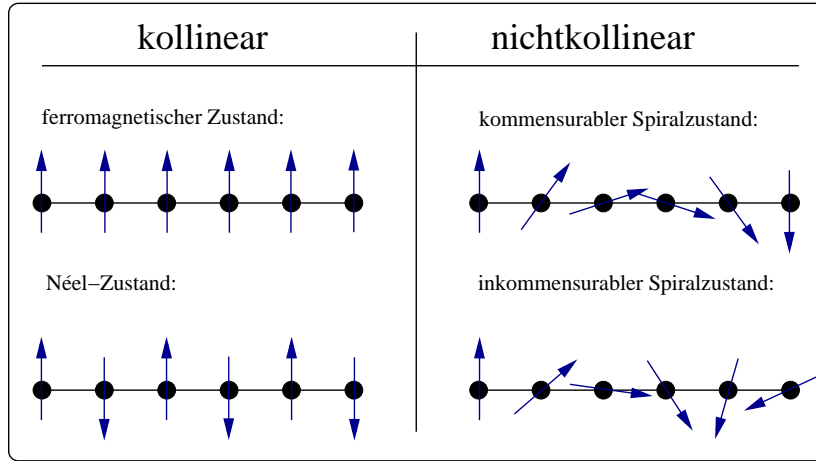


Abbildung 4.2: Veranschaulichung der in diesem Kapitel betrachteten kollinearen und nichtkollinearen Spinausrichtungen.

Für die klassische Grundzustandsenergie pro Spin erhält man des Weiteren:

$$E = \frac{J_1}{4} \cos(\alpha_{cl}) + \frac{J_2}{4} \cos(2\alpha_{cl}) - \frac{J_{\perp}^A}{4} + \frac{J_{\perp}^F}{4}. \quad (4.4)$$

In (4.4) setzt man für ferromagnetisch gekoppelte Ketten die antiferromagnetische Kopplung $J_{\perp}^A = 0$ und umgekehrt.

4.2.2 Analytische Aufstellung des Ket-Gleichungssystems

Die analytische Aufstellung des Ket-Gleichungssystems wird hier entsprechend des vorgestellten Rezeptes (Abschnitt 2.3.9) durchgeführt und dient als Demonstration der Methode. Diese Vorgehensweise ist typisch für die analytische Verwendung der CCM bei der Untersuchung von Quantenspinsystemen. Die zugrundeliegende Systematik ist darüber hinaus verallgemeinerbar (Hamilton-Operator, Näherungsstufe und Quantenspin) und stellt die Grundlage des numerischen CCM-Programmpaketes [5] dar, das für diese Arbeit verwendet wird. Darüber hinaus gibt diese analytische Betrachtung Einblicke in die Struktur der (nichtlinearen) Gleichungssysteme und zeigt den methodischen Aufwand.

• Schritt 1: Wahl eines Modellzustandes

Der hier verwendete Modellzustand orientiert sich am klassischen Grundzustand des Systems. Im Abschnitt zuvor wurde festgestellt, dass es sich hierbei in Abhängigkeit der Systemparameter um einen ferromagnetischen Zustand $|\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots\rangle$, um einen antiferromagnetischen Zustand (Néel-Zustand) $|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots\rangle$ oder um einen Zustand mit spiralartigen Korrelationen entlang der Ketten, symbolisiert (vgl. auch Abbildung 4.2) durch $|\Phi\rangle = |\uparrow\nearrow\rightarrow\searrow\downarrow\swarrow \dots\rangle$, handelt. Dieser im Allgemeinen nichtkollineare Spiralzustand wird durch den Winkel α charakterisiert ($|\Phi\rangle = |\Phi(\alpha)\rangle$) und beinhaltet beide anderen kollinearen klassischen Grundzustände für $\alpha = 0$ bzw. für $\alpha = \pi$. Der Spiralwinkel α_{qu} im Quantenmodell kann vom klassischen Verhalten abweichen, weswegen nicht der klassische Spiralwinkel α_{cl} verwendet, sondern α als freier Parameter in die

Berechnungen einbezogen wird. Die Grundzustandsenergie E wird damit zu einer Funktion des Spiralwinkels, aus der der optimale Winkel durch Minimierung $\frac{dE}{d\alpha}|_{\alpha=\alpha_{qu}} = 0$ der Grundzustandsenergie gewonnen wird.

- **Schritt 2: Koordinatentransformation**

Im Abschnitt 2.3.1 wurden Koordinatentransformationen als ein wichtiger Arbeitsschritt bei der Anwendung der CCM betrachtet. Um alle Spins an allen Gitterplätzen gleichwertig behandeln zu können, rotiert man das betrachtete Koordinatensystem so, dass im gedrehten System alle Spins in negative z -Richtung weisen. Im allgemeinen Fall ist diese Drehung nach (2.20) durchzuführen. Für die hier betrachteten Spiralen ist jedoch die Winkeldifferenz zwischen zwei benachbarten Spins innerhalb der Kette gleich und die Koordinatentransformation wird durch (2.22) beschrieben. Die zwischen den Ketten wirkenden Kopplungen sind ferro- oder antiferromagnetisch, was zu einer parallelen oder antiparallelen Einstellung der Spins zwischen den Ketten führt. Im ferromagnetischen Fall ist für die Spins aus verschiedenen Ketten keine, im antiferromagnetischen Fall für den jeweiligen up-Spin aus zwei benachbarten Ketten eine Drehung um π erforderlich. Beide Spezialfälle, zum einen der ferromagnetische Grundzustand für $\alpha = 0$ und zum anderen der Néel-Zustand für $\alpha = \pi$, sind in der allgemeineren Formel (2.22) bereits enthalten.

Setzt man also (2.22) passend in den Hamilton-Operator (4.1) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) + 1](s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^- + s_{i,n}^- s_{i+1,n}^+) + [\cos(\alpha) - 1](s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+1,n}^-) \\
&+ 2 \sin(\alpha)[s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^z - s_{i,n}^z s_{i+1,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+1,n}^z - s_{i,n}^z s_{i+1,n}^-] + 4 \cos(\alpha) s_{i,n}^z s_{i+1,n}^z \\
&+ \frac{J_2}{4} \sum_{i,n} [\cos(2\alpha) + 1](s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^- + s_{i,n}^- s_{i+2,n}^+) + [\cos(2\alpha) - 1](s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+2,n}^-) \\
&+ 2 \sin(2\alpha)[s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^z - s_{i,n}^z s_{i+2,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+2,n}^z - s_{i,n}^z s_{i+2,n}^-] + 4 \cos(2\alpha) s_{i,n}^z s_{i+2,n}^z \\
&- \frac{J_{\perp}^A}{2} \sum_{i,n} (s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ + s_{i,n}^- s_{i,n+1}^- + 2s_{i,n}^z s_{i,n+1}^z) \\
&+ \frac{J_{\perp}^F}{2} \sum_{i,n} (s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^- + s_{i,n}^- s_{i,n+1}^+ + 2s_{i,n}^z s_{i,n+1}^z). \tag{4.5}
\end{aligned}$$

In diesem Hamilton-Operator (die Kennzeichnung der Koordinatentransformation mit einem Akzent wurde unterdrückt) sind formell noch alle Wechselwirkungen enthalten. Für ferromagnetisch gekoppelte Ketten wählt man $J_{\perp}^A = 0$ und für antiferromagnetisch gekoppelte Ketten entsprechend $J_{\perp}^F = 0$.

- **Schritt 3: Fundamentale Konfigurationen und Ähnlichkeitstransformation**

In der hier betrachteten Näherungsstufe *SUB2-3* werden nur Konfigurationen verwendet, die bis zu zwei Spin-Operatoren auf einem Gebiet von drei aneinandergrenzenden Gitterplätzen berücksichtigen. Zum Auffinden der fundamentalen Konfigurationen wird entsprechend Abschnitt 2.3.4 ein rechtwinkliges Begrenzungsdreieck mit einer Kathetenlänge von drei Gitterplätzen gewählt. In diesem Begrenzungsdreieck sucht man nun

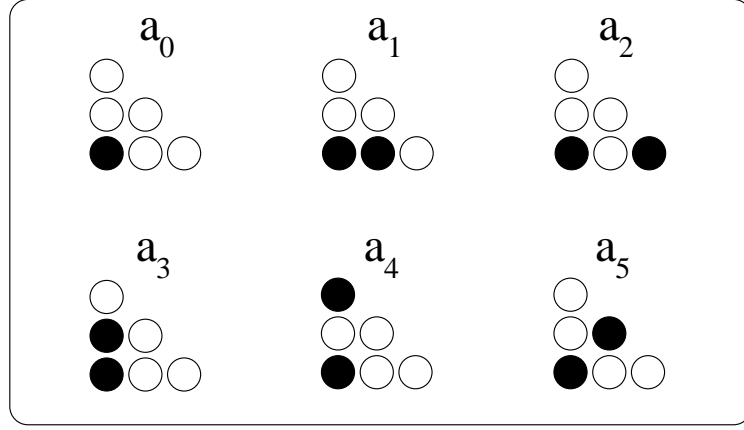


Abbildung 4.3: Illustration der fundamentalen Konfigurationen in *SUB2-3*. Die schwarz gefüllten Kreise repräsentieren die Gitterplätze, die zur fundamentalen Konfiguration gehören. Auf jeden dieser Gitterplätze wirkt jeweils ein Spin-Operator.

alle Formen, die den Bedingungen der Näherungsstufe entsprechen. Unter Berücksichtigung der Punktsymmetrie des Modells (Spiegelung an der y -Achse; Ketten laufen in x -Richtung):

$$x \rightarrow x, \quad y \rightarrow y; \quad x \rightarrow x, \quad y \rightarrow -y, \quad (4.6)$$

verbleiben zunächst sechs *fundamentale* Konfigurationen. Diese sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Bevor die Ähnlichkeitstransformation durchgeführt wird, kann man zum einen den Hamilton-Operator vereinfachen und zum anderen die Konfiguration a_0 aus Abbildung 4.3 auslassen. Wie in der Einleitung angegeben, wurde in [62] eine frustrierte Spinkette in *SUB2-3* untersucht, welche einen Grenzfall des hier betrachteten Modells darstellt. Es wurde dort argumentiert, dass aus Symmetriegründen die Grundzustandsenergie eine gerade Funktion des Spiralwinkels α ist. Es wurden somit die Sinus-Terme aus dem Hamilton-Operator entfernt und nur Konfigurationen mit einer geraden Anzahl von Spin-Operatoren berücksichtigt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden beide Aussagen auf das hier betrachtete Modell übertragen und entsprechend kontrolliert. Es zeigte sich, dass bei einer analytischen Aufstellung des Gleichungssystems unter Einbezug der Sinus-Terme sich letztere gegenseitig wegkürzen und der einzig physikalisch sinnvolle Wert des Koeffizienten für die Konfiguration mit einem Spin-Operator Null ist. Beide Aussagen wurden auch innerhalb einer numerischen Proberechnung bestätigt. Für die folgenden Betrachtungen wird deshalb der Hamilton-Operator (4.5) ohne die Sinus-Terme verwendet:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) + 1](s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^- + s_{i,n}^- s_{i+1,n}^+) + [\cos(\alpha) - 1](s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+1,n}^-) \\
&+ 4 \cos(\alpha) s_{i,n}^z s_{i+1,n}^z + \frac{J_2}{4} \sum_{i,n} [\cos(2\alpha) + 1](s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^- + s_{i,n}^- s_{i+2,n}^+) \\
&+ [\cos(2\alpha) - 1](s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^+ + s_{i,n}^- s_{i+2,n}^-) + 4 \cos(2\alpha) s_{i,n}^z s_{i+2,n}^z - \frac{J_{\perp}^A}{2} \sum_{i,n} (s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ \\
&+ s_{i,n}^- s_{i,n+1}^- + 2s_{i,n}^z s_{i,n+1}^z) + \frac{J_{\perp}^F}{2} \sum_{i,n} (s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^- + s_{i,n}^- s_{i,n+1}^+ + 2s_{i,n}^z s_{i,n+1}^z). \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Die verbleibenden fundamentalen Konfigurationen in dieser Näherungsstufe sind a_1 , a_2 , a_3 , a_4 und a_5 (vgl. Abbildung 4.3).

Nach der Ähnlichkeitstransformation entsprechend Abschnitt 2.3.3, folgt nun für den Hamilton-Operator (4.7):

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= e^{-S} H e^S \\
&= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) + 1] (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i+1,n}^- + \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i+1,n}^+) + [\cos(\alpha) - 1] (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i+1,n}^+ + \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i+1,n}^-) \\
&+ 4 \cos(\alpha) \hat{s}_{i,n}^z \hat{s}_{i+1,n}^z + \frac{J_2}{4} \sum_{i,n} [\cos(2\alpha) + 1] (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i+2,n}^- + \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i+2,n}^+) \\
&+ [\cos(2\alpha) - 1] (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i+2,n}^+ + \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i+2,n}^-) + 4 \cos(2\alpha) \hat{s}_{i,n}^z \hat{s}_{i+2,n}^z - \frac{J_{\perp}^A}{2} \sum_{i,n} (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i,n+1}^+ \\
&+ \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i,n+1}^- + 2 \hat{s}_{i,n}^z \hat{s}_{i,n+1}^z) + \frac{J_{\perp}^F}{2} \sum_{i,n} (\hat{s}_{i,n}^+ \hat{s}_{i,n+1}^- + \hat{s}_{i,n}^- \hat{s}_{i,n+1}^+ + 2 \hat{s}_{i,n}^z \hat{s}_{i,n+1}^z). \quad (4.8)
\end{aligned}$$

Die Näherungsstufe berücksichtigt man durch Verwendung einer bestimmten Anzahl von Summanden aus den Operatoren F_k und G_{km} entsprechend (2.32):

$$\begin{aligned}
F_k &= \sum_{l=0} (l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ = [k] + 2 \sum_i [k i] s_i^+ + 3 \sum_{i,j} [k i j] s_i^+ s_j^+ \dots \\
G_{km} &= \sum_{l=0} (l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [k m i_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ \\
&= 2[km] + 6 \sum_i [k m i] s_i^+ + 12 \sum_{i,j} [k m i j] s_i^+ s_j^+ + \dots \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Da es nur Konfigurationen mit zwei Gitterplätzen gibt, werden in den später aufzustellenden Ket-Gleichungen nur solche Terme einen Beitrag leisten, die ein Produkt von genau zwei Einzelspin-Operatoren, entsprechend einer der fünf fundamentalen Konfiguration, beinhalten. Damit sind aus (4.9) für F_k nur der zweite und für G_{km} nur der erste Summand relevant.

Auch für die Umsetzung der Ähnlichkeitstransformation werden aus (2.38) nur die folgenden Wechselwirkungsterme benötigt:

$$\begin{aligned}
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= (2G_{km}^2 s_k^+ s_m^+ - 2G_{km} F_m s_m^+ - 2G_{km} F_k s_k^+ + F_k F_m) |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^- |\Phi\rangle &= F_m s_k^+ |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^- \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= F_k s_m^+ |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^+ \hat{s}_m^+ |\Phi\rangle &= s_k^+ s_m^+ |\Phi\rangle \\
\hat{s}_k^z \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= (G_{km} s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} F_k s_k^+ - \frac{1}{2} F_m s_m^+) |\Phi\rangle. \quad (4.10)
\end{aligned}$$

Man beachte hierbei, dass von den hier angegebenen Wechselwirkungstermen (2.38) ebenfalls nur solche Anteile weiterverwendet wurden, wenn durch diese auch ein Beitrag zu erwarten ist.

Setzt man diese Terme in den Hamilton-Operator (4.8) ein, so erhält man den für diese

Naherungsstufe gultigen ahnlichkeitstransformierten Hamilton-Operator:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) - 1] (s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ + 2G_1^2 s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ - 2G_1 F_{i+1,n} s_{i+1,n}^+ - 2G_1 F_{i,n} s_{i,n}^+ \\
&+ F_{i,n} F_{i+1,n}) + [\cos(\alpha) + 1] (F_{i,n} s_{i+1,n}^+ + F_{i+1,n} s_{i,n}^+) + 4 \cos(\alpha) (G_1 s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ \\
&- \frac{1}{2} F_{i,n} s_{i,n}^+ - \frac{1}{2} F_{i+1,n} s_{i+1,n}^+) \\
&+ \frac{J_2}{4} \sum_{i,n} [\cos(2\alpha) - 1] (s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^+ + 2G_2^2 s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^+ - 2G_2 F_{i+2,n} s_{i+2,n}^+ - 2G_2 F_{i,n} s_{i,n}^+ \\
&+ F_{i,n} F_{i+2,n}) + [\cos(2\alpha) + 1] (F_{i,n} s_{i+2,n}^+ + F_{i+2,n} s_{i,n}^+) + 4 \cos(2\alpha) (G_2 s_{i,n}^+ s_{i+2,n}^+ \\
&- \frac{1}{2} F_{i,n} s_{i,n}^+ - \frac{1}{2} F_{i+2,n} s_{i+2,n}^+) \\
&- \frac{J_\perp^A}{2} \sum_{i,n} [s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ + 2G_3^2 s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ - 2G_3 F_{i,n+1} s_{i,n+1}^+ - 2G_3 F_{i,n+1} s_{i,n}^+ \\
&+ F_{i,n} F_{i,n+1} + 2(G_3 s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ - \frac{1}{2} F_{i,n} s_{i,n}^+ - \frac{1}{2} F_{i,n+1} s_{i,n+1}^+)] \\
&+ \frac{J_\perp^F}{2} \sum_{i,n} [F_{i,n} s_{i,n+1}^+ + F_{i,n+1} s_{i,n}^+ + 2(G_3 s_{i,n}^+ s_{i,n+1}^+ - \frac{1}{2} F_{i,n} s_{i,n}^+ \\
&- \frac{1}{2} F_{i,n+1} s_{i,n+1}^+)]. \tag{4.11}
\end{aligned}$$

• **Schritt 4: Aufstellung des Ket-Gleichungssystems**

Um das Ket-Gleichungssystem aufzustellen, ist es empfehlenswert, die Groen G_{km} und F_k auszuschreiben und die Konfigurationen zu benennen. Wie in Abbildung 4.3 dargestellt, sind die funf fundamentalen Konfigurationen mit a_1, \dots, a_5 bezeichnet und die hierzu passenden $G_{km} = 2[km]$ sind:

$$G_1 = 2a_1, \quad G_2 = 2a_2, \quad G_3 = 2a_3. \tag{4.12}$$

Wegen der Anordnung der Spins im Hamilton-Operator gibt es hierbei $G_{km} \equiv G_4 = 2a_4$ und $G_{km} \equiv G_5 = 2a_5$ nicht. In 4.12 sind somit fur $G_{km} = 2[km]$ alle Moglichkeiten bereits enthalten. Schreibt man die Groen $F_{i,n}$, $F_{i+1,n}$, $F_{i+2,n}$ und $F_{i,n+1}$ aus, so erhalt man:

$$\begin{aligned}
F_{i,n} &= 2a_1 (s_{i-1,n}^+ + s_{i+1,n}^+) + 2a_2 (s_{i-2,n}^+ + s_{i+2,n}^+) + 2a_3 (s_{i,n+1}^+ + s_{i,n-1}^+) \\
&+ 2a_4 (s_{i,n+2}^+ + s_{i,n-2}^+) + 2a_5 (s_{i+1,n+1}^+ + s_{i+1,n-1}^+ + s_{i-1,n+1}^+ + s_{i-1,n-1}^+), \\
F_{i+1,n} &= 2a_1 (s_{i,n}^+ + s_{i+2,n}^+) + 2a_2 (s_{i-1,n}^+ + s_{i+3,n}^+) + 2a_3 (s_{i+1,n+1}^+ + s_{i+1,n-1}^+) \\
&+ 2a_4 (s_{i+1,n+2}^+ + s_{i+1,n-2}^+) + 2a_5 (s_{i+2,n+1}^+ + s_{i+2,n-1}^+ + s_{i,n+1}^+ + s_{i,n-1}^+), \\
F_{i+2,n} &= 2a_1 (s_{i+1,n}^+ + s_{i+3,n}^+) + 2a_2 (s_{i,n}^+ + s_{i+4,n}^+) + 2a_3 (s_{i+2,n+1}^+ + s_{i+2,n-1}^+) \\
&+ 2a_4 (s_{i+2,n+2}^+ + s_{i+2,n-2}^+) + 2a_5 (s_{i+3,n+1}^+ + s_{i+3,n-1}^+ + s_{i+1,n+1}^+ + s_{i+1,n-1}^+), \\
F_{i,n+1} &= 2a_1 (s_{i-1,n+1}^+ + s_{i+1,n+1}^+) + 2a_2 (s_{i-2,n+1}^+ + s_{i+2,n+1}^+) + 2a_3 (s_{i,n}^+ + s_{i,n+2}^+) \\
&+ 2a_4 (s_{i,n-1}^+ + s_{i,n+3}^+) + 2a_5 (s_{i+1,n+2}^+ + s_{i-1,n+2}^+ + s_{i,n}^+ + s_{i-1,n}^+). \tag{4.13}
\end{aligned}$$

Um die Position der Gitterplatze zu veranschaulichen sowie fur die Ermittlung von Beitragen fur das Ket-Gleichungssystem, ist die in Abbildung 4.4 dargestellte Uber-sicht sehr hilfreich. Die Groen (4.12) und (4.13) setzt man in den Hamilton-Operator

$i-3,n+3$	$i-2,n+3$	$i-1,n+3$	$i,n+3$	$i+1,n+3$	$i+2,n+3$	$i+3,n+3$	$i+4,n+3$
$i-3,n+2$	$i-2,n+2$	$i-1,n+2$	$i,n+2$	$i+1,n+2$	$i+2,n+2$	$i+3,n+2$	$i+4,n+2$
$i-3,n+1$	$i-2,n+1$	$i-1,n+1$	$i,n+1$	$i+1,n+1$	$i+2,n+1$	$i+3,n+1$	$i+4,n+1$
$i-3,n$	$i-2,n$	$i-1,n$	i,n	$i+1,n$	$i+2,n$	$i+3,n$	$i+4,n$
$i-3,n-1$	$i-2,n-1$	$i-1,n-1$	$i,n-1$	$i+1,n-1$	$i+2,n-1$	$i+3,n-1$	$i+4,n-1$
$i-3,n-2$	$i-2,n-2$	$i-1,n-2$	$i,n-2$	$i+1,n-2$	$i+2,n-2$	$i+3,n-2$	$i+4,n-2$
$i-3,n-3$	$i-2,n-3$	$i-1,n-3$	$i,n-3$	$i+1,n-3$	$i+2,n-3$	$i+3,n-3$	$i+4,n-3$

Abbildung 4.4: Darstellung der Bezeichnungen der Gitterplätze als Bestimmungshilfe des Ket-Gleichungssystems und zur Illustration der verwendeten Indizes für eine graphische Auswertung. Die Größe dieses Gitterausschnittes ist so gewählt, dass alle auftretenden Terme des ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Operators für die Bestimmung des Gleichungssystems in dieser Näherungsstufe berücksichtigt sind.

(4.11) ein. Man erhält einen recht umfangreichen Hamilton-Operator, dessen Terme alle aus jeweils einem Produkt zweier Spinerzeugungs-Operatoren bestehen. Ein Teil dieses Hamilton-Operators soll hier stellvertretend angegeben werden:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) - 1] (s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ + 2G_1^2 s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ - 2G_1 F_{i+1,n} s_{i+1,n}^+ + \dots) \\
&= \frac{J_1}{4} \sum_{i,n} [\cos(\alpha) - 1] (s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ + 8a_1^2 s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1^2 s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1^2 s_{i+1,n}^+ s_{i+2,n}^+ \\
&\quad - 8a_1 a_2 s_{i-1,n}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_2 s_{i+1,n}^+ s_{i+3,n}^+ - 8a_1 a_3 s_{i+1,n+1}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_3 s_{i+1,n-1}^+ s_{i+1,n}^+ \\
&\quad - 8a_1 a_4 s_{i+1,n+2}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_4 s_{i+1,n-2}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_5 s_{i+2,n+1}^+ s_{i+1,n}^+ \\
&\quad - 8a_1 a_5 s_{i+2,n-1}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_5 s_{i,n+1}^+ s_{i+1,n}^+ - 8a_1 a_5 s_{i,n-1}^+ s_{i+1,n}^+ + \dots) \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Für jede der hier berücksichtigten Konfigurationen findet man eine spezielle Ket-Gleichung in Abhängigkeit aller Korrelationskoeffizienten. Alle Ket-Gleichungen zusammen bilden das nichtlineare Ket-Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi | s_{l,p}^- s_{l+1,p}^- \hat{H} | \Phi \rangle &= 0 \text{ Ket-Gleichung 1 (zu } a_1), \\
\langle \Phi | s_{l,p}^- s_{l+2,p}^- \hat{H} | \Phi \rangle &= 0 \text{ Ket-Gleichung 2 (zu } a_2), \\
\langle \Phi | s_{l,p}^- s_{l,p+1}^- \hat{H} | \Phi \rangle &= 0 \text{ Ket-Gleichung 3 (zu } a_3), \\
\langle \Phi | s_{l,p}^- s_{l,p+2}^- \hat{H} | \Phi \rangle &= 0 \text{ Ket-Gleichung 4 (zu } a_4), \\
\langle \Phi | s_{l,p}^- s_{l+1,p+1}^- \hat{H} | \Phi \rangle &= 0 \text{ Ket-Gleichung 5 (zu } a_5). \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Die Vernichtungsoperatoren in (4.15) sollen dabei entsprechend der Anordnung der Spins in den zugeordneten Konfigurationen wirken. Wie in Abschnitt 2.3.4 beschrieben, entsteht wegen (2.40) nur dann ein Beitrag, wenn die Vernichtungsoperatoren der Konfiguration die Wirkung der Erzeugungsoperatoren aus dem Ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Operator in Bezug auf den Modellzustand $|\Phi\rangle$ rückgängig machen. Um festzustellen, welcher Term in welcher Ket-Gleichung einen Beitrag liefert, werden in (4.14) diejenigen Terme ausgewählt, deren Indizes mit denen der Konfiguration übereinstimmen. Mit Hilfe der Abbildung 4.4 kann man nun entscheiden, ob und in welcher Ket-Gleichung ein Beitrag entsteht. So trägt aus (4.14) der Term $s_{i,n}^+ s_{i+1,n}^+$ (Term 1) in der Ket-Gleichung zu a_1 den Summanden 1 bei und der Term $-8a_1 a_2 s_{i-1,n}^+ s_{i+1,n}^+$ (Term 5) in der Ket-Gleichung zu a_2 den Summanden $-8a_1 a_2$. Am umfangreichsten ist die Untersuchung der Produktterme $F_{i,n} F_{i+1,n}$, $F_{i,n} F_{i+2,n}$ und $F_{i,n} F_{i,n+1}$, weswegen hier nur $F_{i,n} F_{i+1,n}$ exemplarisch diskutiert wird. Das Produkt $F_{i,n} F_{i+1,n}$ beinhaltet 144 Einzelterme, von denen allerdings nicht alle beitragen. So liefert der erste Produktterm (man betrachte hierzu (4.13)) $2a_1 s_{i-1,n}^+ \cdot 2a_1 s_{i,n}^+$ den Beitrag $4a_1^2$ in der Ket-Gleichung zu a_1 . Die ebenfalls auftretenden Produktterme $2a_1 s_{i-1,n}^+ \cdot 2a_2 s_{i-1,n}^+$ (Term 1 aus $F_{i,n}$ multipliziert mit Term 3 aus $F_{i+1,n}$) und $2a_1 s_{i-1,n}^+ \cdot 2a_2 s_{i+3,n}^+$ (Term 1 aus $F_{i,n}$ multipliziert mit Term 4 aus $F_{i+1,n}$) tragen dagegen in keiner Ket-Gleichung bei, Ersterer nicht, weil zwei Operatoren auf den gleichen Gitterplatz wirken und dies wegen $(s^+)^2 |\Phi\rangle = 0$ keinen Beitrag ergibt und Zweiterer nicht, weil die Anordnung der Operatoren keiner Konfiguration entspricht. Bild 4.4 zeigt, dass der Abstand der entsprechenden Gitterplätze zu groß ist.

Insgesamt kann man also feststellen, dass die Zuordnung der Beiträge in der analytischen Aufstellung des Gleichungssystems wegen der hohen Zahl zu untersuchender Terme aufwändig, jedoch prinzipiell nicht schwierig ist. Die Produktterme $F_{i,n} F_{i+2,n}$

und $F_{i,n}F_{i,n+1}$, sowie die anderen noch nicht berücksichtigten weiteren Terme aus (4.11), wertet man wie die angegebenen Beispiele aus. Man erhält schlussendlich das folgende Ket-Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](1 - 12a_1^2 + 8a_2^2 + 8a_3^2 + 8a_4^2 + 24a_5^2) + 4a_2[\cos(\alpha) + 1] - 8a_1 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](16a_3a_5 - 16a_1a_2) + 4a_1[\cos(2\alpha) + 1] - 16a_1 \cos(2\alpha) \} \\
& + \frac{J_{\perp}^F}{2} (8a_5 - 8a_1) - \frac{J_{\perp}^A}{2} (16a_4a_5 - 16a_1a_3 - 16a_2a_5 - 8a_1) = 0, \tag{4.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](-16a_1a_2 + 16a_3a_5) + 4a_1[\cos(\alpha) + 1] - 16a_2 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](1 - 12a_2^2 + 8a_1^2 + 8a_3^2 + 8a_4^2 + 16a_5^2) - 8a_2 \cos(2\alpha) \} \\
& - \frac{J_{\perp}^F}{2} (8a_2) - \frac{J_{\perp}^A}{2} (16a_1a_5 - 16a_2a_3 - 8a_2) = 0, \tag{4.17}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](-16a_1a_3 + 16a_2a_5 + 16a_4a_5) + 8a_5[\cos(\alpha) + 1] - 16a_3 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](-16a_2a_3 + 16a_1a_5) - 16a_3 \cos(2\alpha) \} \\
& + \frac{J_{\perp}^F}{2} (4a_4 - 4a_3) - \frac{J_{\perp}^A}{2} (1 - 12a_3^2 + 8a_1^2 + 8a_2^2 + 8a_4^2 + 25a_5^2 - 4a_3) = 0, \tag{4.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](-16a_1a_4 + 16a_3a_5) - 16a_4 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](-16a_2a_4 + 8a_5^2) - 16a_4 \cos(2\alpha) \} \\
& + \frac{J_{\perp}^F}{2} (4a_3 - 8a_4) - \frac{J_{\perp}^A}{2} (-16a_3a_4 + 16a_1a_5 - 8a_4) = 0, \tag{4.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](16a_2a_3 - 16a_1a_5 - 16a_3a_4) + 8a_3[\cos(\alpha) + 1] - 32a_5 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](16a_1a_3 - 32a_2a_5 + 16a_4a_5) + 8a_5[\cos(2\alpha) + 1] - 32a_5 \cos(2\alpha) \} \\
& + \frac{J_{\perp}^F}{2} (8a_1 - 16a_5) - \frac{J_{\perp}^A}{2} (16a_1a_2 - 16a_3a_5 + 16a_1a_4 - 16a_5) = 0. \tag{4.20}
\end{aligned}$$

In diesem Gleichungssystem sind die *SUB2-3*- bzw. die *LSUB2*-Gleichungen einiger Spezialfälle enthalten. Setzt man z.B. die Zwischenkettenkopplung $J_{\perp} = 0$, so kann man die Lösung $a_3 = a_4 = a_5 = 0$ ablesen und erhält ein gekoppeltes Gleichungssystem aus zwei Gleichungen für die Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 :

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](1 - 12a_1^2 + 8a_2^2) + 4a_2[\cos(\alpha) + 1] - 8a_1 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](-16a_1a_2) + 4a_1[\cos(2\alpha) + 1] - 16a_1 \cos(2\alpha) \} = 0, \tag{4.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{J_1}{4} \{ [\cos(\alpha) - 1](-16a_1a_2) + 4a_1[\cos(\alpha) + 1] - 16a_2 \cos(\alpha) \} \\
& + \frac{J_2}{4} \{ [\cos(2\alpha) - 1](1 - 12a_2^2 + 8a_1^2) - 8a_2 \cos(2\alpha) \} = 0. \tag{4.22}
\end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem stimmt mit dem in [62] bestimmten Gleichungssystem für die frustrierte $J_1 - J_2$ -Kette überein. Die *LSUB2*-Gleichungen des in Abschnitt 4.4 für $J_\perp > 0$ untersuchten quasi-eindimensionalen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systems ergeben sich für $J_1 \neq 0$, $J_\perp \neq 0$ und $J_2 = 0$. Setzt man zusätzlich $J_1 = J_\perp$ bzw. $J_\perp = 0$, so erhält man die *LSUB2*-Gleichungen für das einfache Quadratgitter bzw. für die einfache lineare Kette. Die zu diesen Systemen gehörigen *LSUB2*-Gleichungen wurden im Rahmen dieser Arbeit auch auf direktem Weg bestimmt. Ein Vergleich zeigte hier die notwendige Übereinstimmung³. Das analytisch bestimmte Gleichungssystem wurde zur schlussendlichen Kontrolle mit dem numerisch bestimmten Gleichungssystem des für diese Arbeit verwendeten Programmpaketes verglichen und stimmt mit diesem überein.

Die Grundzustandsenergie ist unter Berücksichtigung der getroffenen Aussagen in Abschnitt 2.3.5 von den Termen des Ähnlichkeitstransformierten Hamilton-Operators abhängig, die keine Erzeugungsoperatoren beinhalten. Dies betrifft aus (2.38) lediglich den Term G_{km} aus $\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle$ und den Term $\frac{1}{4}$ aus $\hat{s}_k^z \hat{s}_m^z |\Phi\rangle$. Diese tragen jedoch nicht zu den Ket-Gleichungen bei und sind deshalb nicht in (4.11) enthalten. Unter Verwendung dieser Wechselwirkungsterme aus (2.38) findet man für die Grundzustandsenergie (pro Spin):

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{N} \langle \Phi | e^{-S} H e^S | \Phi \rangle \equiv \frac{1}{N} \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \\
&= \langle \Phi | \frac{J_1}{4N} \sum_{i,n} \{ [\cos(\alpha) - 1] G_1 + \cos(\alpha) \} \\
&\quad + \frac{J_2}{4N} \sum_{i,n} \{ [\cos(2\alpha) - 1] G_2 + \cos(2\alpha) \} \\
&\quad + \frac{J_\perp^F}{2N} \sum_{i,n} \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{J_\perp^A}{2N} \sum_{i,n} \left(G_3 + \frac{1}{2} \right) | \Phi \rangle \\
&= \frac{J_1}{4} \{ 2a_1 [\cos(\alpha) - 1] + \cos(\alpha) \} + \frac{J_2}{4} \{ 2a_2 [\cos(2\alpha) - 1] + \cos(2\alpha) \} \\
&\quad + \frac{J_\perp^F}{4} - \frac{J_\perp^A}{4} (4a_3 + 1). \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Man erkennt, dass die Grundzustandsenergie bei fixierten Kopplungen und festem Winkel (für alle Näherungsstufen) nur von den Korrelationskoeffizienten a_1 , a_2 und a_3 abhängig ist.

4.3 Ergebnisse für das frustrierte quasi-1d J_1 - J_2 -Modell in *SUB2-3*

In diesem Abschnitt erfolgt die numerische Untersuchung des zuvor bestimmten Ket-Gleichungssystems zur Bestimmung des Verhaltens der Grundzustandsenergie E und des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} in Abhängigkeit der Frustration J_2 und der Zwischenkettenkopplung J_\perp . Des Weiteren wurde der Punkt J_2^s berechnet, wo die Grundzustands-Spin-Spin-Korrelationen von kollinearem zu nichtkollinearem Verhalten wechseln. Im

³Diese Übereinstimmung diente auch als erste Kontrolle des Gleichungssystems (4.16)-(4.20).

Folgendes wird dieser Punkt als Phasenübergang bezeichnet⁴. Zur besseren Übersicht wurden die Resultate in vier Gruppen sortiert:

- (i) $J_1 = 1, J_\perp \geq 0$ (ii) $J_1 = 1, J_\perp \leq 0$
 (iii) $J_1 = -1, J_\perp \geq 0$ (iv) $J_1 = -1, J_\perp \leq 0$.

Die Fälle (i) und (ii) sind sich recht ähnlich, weswegen sie hier gemeinsam diskutiert werden. Der Quanten-Spiralwinkel α_{qu} in Abhängigkeit von J_2 ist in Abbildung 4.5 [Fall (i)] und Abbildung 4.6 [Fall (ii)] dargestellt. Zum Vergleich wurden die entsprechenden DMRG-Daten von White und Affleck ([64]) für den frustrierten eindimensionalen Fall des hier betrachteten Modells in Abbildung 4.5 mit eingetragen. Diese Daten stimmen für größere J_2 recht gut mit den CCM-Ergebnissen überein. Man erkennt in diesen Abbildungen auch, dass Quantenfluktuationen das klassische Verhalten stark modifizieren. So findet man einen kollinearen Grundzustand in der Region $J_2 > J_2^{s,cl} = 0.25$, wo klassisch bereits spiralartige Korrelationen vorliegen. Dieser Effekt ist auch als *order-from-disorder*-Phänomen [95, 96] bekannt und recht häufig in Quantenspinsystemen anzutreffen [28, 29, 97, 98]. Für $J_\perp = 0$ wurde für das Quantenspinsystem $J_2^s \approx 0.68$ bestimmt, was gut mit bekannten Resultaten (z.B. Abbildung 3 in [65]) übereinstimmt.

Nimmt man nun eine endliche Zwischenkettenkopplung $J_\perp > 0$ hinzu, so wird bei diesem Übergang von einer zu zwei Dimensionen der Einfluss der Quantenfluktuationen geringer und der kollineare Grundzustand verschwindet zu Gunsten eines Zustandes mit inkommensurablen spiralartigen Korrelationen bei kleinerem J_2 , d.h. der Übergangspunkt J_2^s verschiebt sich in Richtung des klassischen Wertes. Diese Verschiebung von J_2^s ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die Quantenfluktuationen verlieren ihre Bedeutung jedoch nicht völlig. Im nahezu isotropen zweidimensionalen System ($J_\perp \approx 1$) findet man noch $J_2^s \approx 0.38$ für Fall (i) und $J_2^s \approx 0.4$ für Fall (ii), was signifikant oberhalb des klassischen Wertes ist.

Die Verschiebung des Übergangspunktes führt darüber hinaus zu einem interessanten Verhalten der Differenz $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$. Diese Differenz ist positiv für $0.25 < J_2 < J_2^*$ und negativ für $J_2 > J_2^*$. Hierbei ist $J_2^* \approx 0.7$ und überraschenderweise nahezu unabhängig von J_\perp . Die Kurven $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$ als Funktionen von J_2 schneiden sich alle nahezu im selben Punkt (man vergleiche hierzu die Abbildungen 4.5 und 4.6). Anzumerken ist hier ebenfalls noch, dass das Modell mit dem stärksten Einfluss der Quantenfluktuationen ($J_\perp = 0$) dem Grenzwert $\alpha_{qu} \rightarrow \frac{\pi}{2}$ am schnellsten zustrebt.

Nun soll das Verhalten des Quanten-Spiralwinkels in der Nähe des Phasenübergangspunktes untersucht werden. Für Werte der Zwischenkettenkopplung $J_\perp < 0.7$ (Fall (i)) und $J_\perp < 0.8$ (Fall (ii)) ist das Verhalten von α_{qu} diskontinuierlich. Ein ähnlich sprunghaftes Verhalten wurde auch in anderen Untersuchungen zweidimensionaler frustrierter Spinsysteme gefunden [28, 29]. Bemerkenswert ist auch, dass die Kurve in [62] vor dem

⁴Hierzu soll jedoch angemerkt werden, dass die Frage nach magnetischer Grundzustandsordnung nicht Gegenstand der hier durchgeführten Untersuchungen ist. Generell kann man argumentieren, dass der 1d HAFM auf der linearen Kette (mit Ausnahme des einfachen ferromagnetischen Zustandes) keine magnetische Fernordnung aufweist. Wie in der Einleitung zu diesem Kapitel angegeben, kann bei Hinzunahme einer Zwischenkettenkopplung der Grundzustand langreichweitig geordnet sein. Für größere Frustration J_2 und kleiner Zwischenkettenkopplung J_\perp ist der Grundzustand magnetisch ungeordnet und kann schwache spontane Dimerisierungen mit kurzreichweitigen spiralartigen inkommensurablen Korrelationen besitzen [80]. J_2^s kennzeichnet für kleine J_\perp demnach die Phase zwischen zwei Parameterregionen, wo sich die kurzreichweitigen magnetischen Korrelationen von kommensurablem zu inkommensurablem Verhalten ändern.

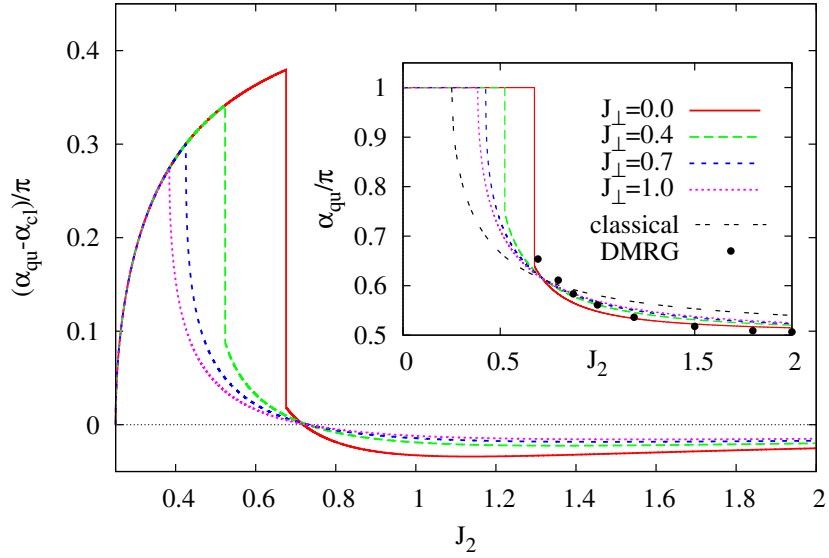


Abbildung 4.5: Illustration des Quanten-Spiralwinkels in Abhängigkeit von J_2 für antiferromagnetische Kopplungen J_1 und J_\perp [Fall (i)]. Im Vordergrund ist die Differenz zwischen dem Quanten-Spiralwinkel α_{qu} und dem klassischen Spiralwinkel α_{cl} , für verschiedene Werte der Zwischenkettenkopplung J_\perp zu sehen. Die entsprechenden Werte für den Quanten-Spiralwinkel α_{qu} selbst, sind im Inset zu sehen. Zum Vergleich wurde auch der klassische Spiralwinkel α_{cl} und die DMRG-Daten von White und Affleck ([64]) für das eindimensionale Modell ($J_\perp = 0$) eingefügt.

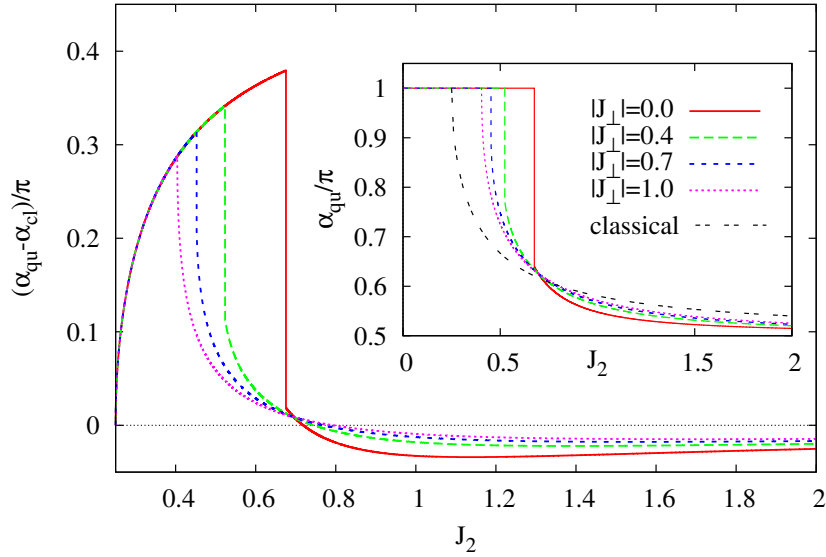


Abbildung 4.6: Illustration des Quanten-Spiralwinkels in Abhängigkeit von J_2 für antiferromagnetische Kopplungen J_1 und ferromagnetische Kopplungen J_\perp [Fall (ii)]. Im Vordergrund ist die Differenz zwischen dem Quanten-Spiralwinkel α_{qu} und dem klassischen Spiralwinkel α_{cl} , für verschiedene Werte der Zwischenkettenkopplung J_\perp zu sehen. Die entsprechenden Werte für den Quanten-Spiralwinkel α_{qu} selbst, sind im Inset zu sehen. Zum Vergleich wurde auch der klassische Spiralwinkel α_{cl} eingefügt.

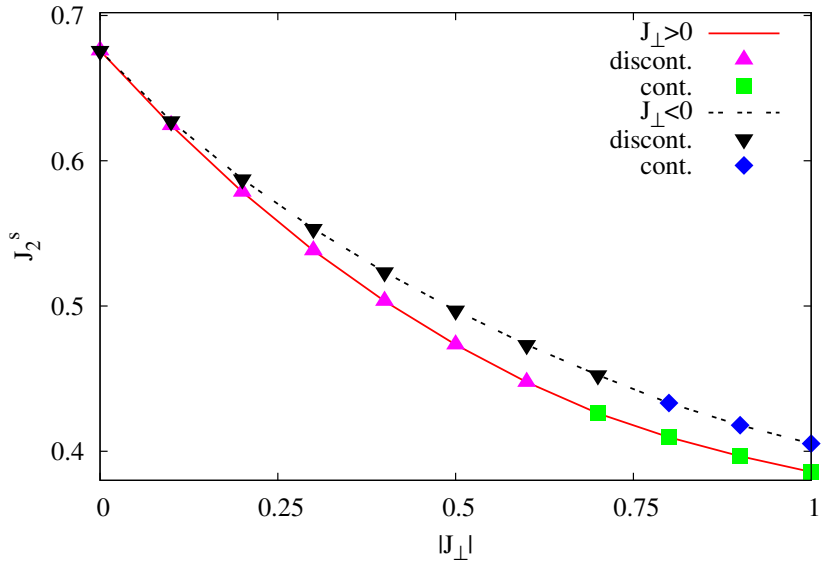


Abbildung 4.7: Darstellung des Phasenübergangspunktes J_2^s als Funktion der Zwischenkettenkopplung J_\perp für $J_1 = 1$ und $J_\perp > 0$ [Fall (i)] sowie für $J_1 = 1$ und $J_\perp < 0$ [Fall (ii)]. Die Dreiecke kennzeichnen hierbei einen diskontinuierlichen und die Quadrate einen kontinuierlichen Übergang.

sprunghaften Verhalten abgebrochen wurde, so dass kein diskontinuierliches Verhalten erkennbar ist⁵. Das diskontinuierliche Verhalten des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} liegt im Verlauf der Grundzustandsenergie E in Abhängigkeit von α begründet. In Abbildung 4.8 erkennt man die Existenz zweier Minima. Der Phasenübergang findet nun bei dem Wert der Frustration J_2 statt, wo beide Minima die gleiche Tiefe besitzen. Für größere

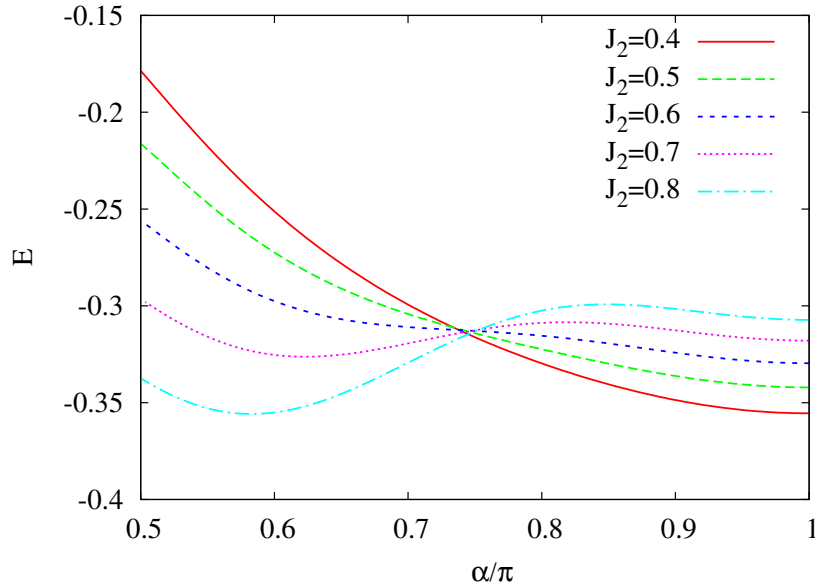


Abbildung 4.8: Darstellung der Grundzustandsenergie E in Abhängigkeit vom Spiralwinkel α für verschiedene, fixierte J_2 und $J_\perp = 0$ ($J_1 = 1$).

Werte der Zwischenkettenkopplung J_\perp (und damit schwächeren Quantenfluktuationen) besitzt die Kurve $E(\alpha)$ nur ein Minimum und das zugehörige Verhalten des Quanten-Spiralwinkels am Übergangspunkt ist kontinuierlich.

Hier soll noch einmal ausdrücklich vom klassischen System unterschieden werden, wo der Übergang von kollinearem zu nichtkollinearem Verhalten immer bei $J_2 = \frac{|J_\perp|}{4}$ stattfindet und unabhängig von J_\perp immer kontinuierlich ist. In Abbildung 4.9 sind die Ket-Korrelationskoeffizienten für den Fall (i) und $J_\perp = 0.3$ dargestellt. Man erkennt am Phasenübergangspunkt das sprunghafte Verhalten und findet eine betragsmäßige Dominanz der Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 - a_3 , während die Koeffizienten a_4 und a_5 nahe bei Null sind. Trotz ihres geringen Betrages, beeinflussen sie die Eigenschaften des Quantensystems jedoch erheblich, was man an dem Einfluss der Zwischenkettenkopplungen erkennt. Zusätzlich gewinnt man mit dieser Abbildung eine Vorstellung von der Größenordnung der Koeffizienten.

In Abbildung 4.10 wurde der Quanten-Spiralwinkel α_{qu} in Abhängigkeit der Zwischenkettenkopplung J_\perp für den Fall (i) und in Abbildung 4.11 für den Fall (ii) dargestellt. Wie bereits diskutiert, verschiebt sich der Quanten-Spiralwinkel in Richtung des klassischen Wertes mit wachsender Zwischenkettenkopplung J_\perp . Zusammen mit dem Vorzeichenwechsel von $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$ als Funktion von J_2 , findet man zwei verschiedene Regime:

⁵Private Kommunikation mit D. J. J. Farnell, einem der Autoren von [62] ergab, dass Hinweise auf diskontinuierliches Verhalten gefunden wurden. Da die DMRG-Daten für den Quanten-Spiralwinkel jedoch kein Sprung zeigten und die CCM für Spinsysteme damals eine sehr neue Methode war, wurden die CCM-Daten in dem diskontinuierlichen Bereich ausgelassen.

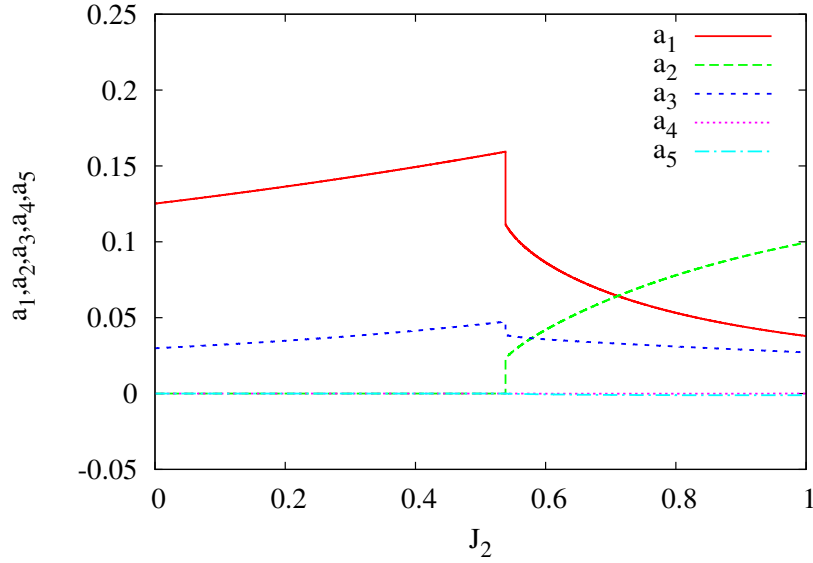


Abbildung 4.9: Darstellung der Ket-Korrelationskoeffizienten für den Fall (i) und $J_{\perp} = 0.3$. Bis zum Phasenübergangspunkt bei $J_2^s = 0.538$ sind a_4 und a_5 Null und anschließend von Null verschieden, jedoch betragsmäßig klein.

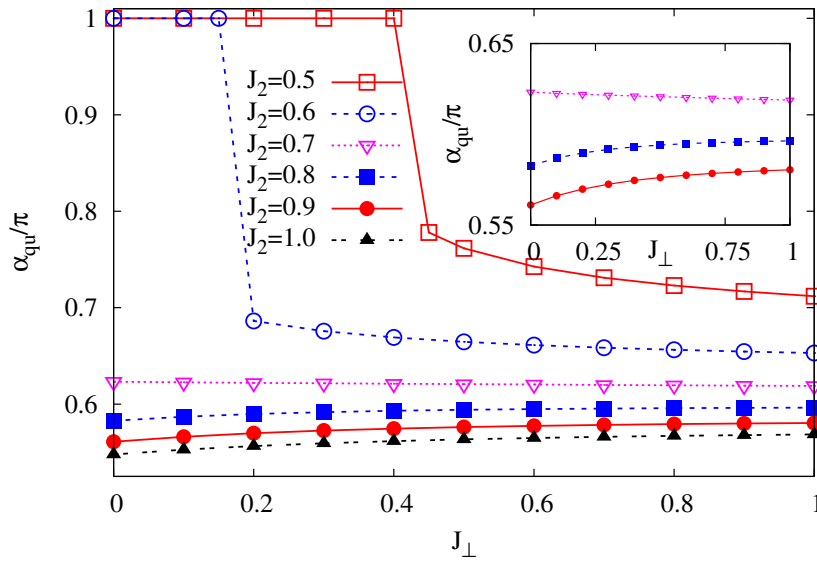


Abbildung 4.10: Illustration des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} für Fall (i) als Funktion der Zwischenkettenkopplung für verschiedene fixierte Werte der Frustration J_2 . Die eingezeichneten Linien stellen eine Hilfe zur Betrachtung dar. Das Inset zeigt einen vergrößerten Ausschnitt für $J_2 = 0.7, 0.8, 0.9$.

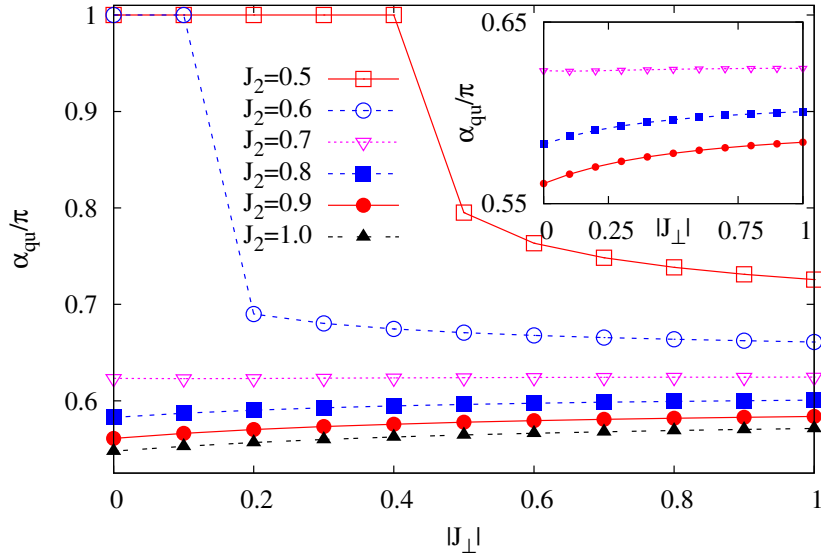


Abbildung 4.11: Illustration des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} für Fall (ii) als Funktion der Zwischenkettenkopplung für verschiedene fixierte Werte der Frustration J_2 . Die eingezeichneten Linien stellen eine Hilfe zur Betrachtung dar. Das Inset zeigt einen vergrößerten Ausschnitt für $J_2 = 0.7, 0.8, 0.9$.

für $J_2 \lesssim J_2^*$ wächst α_{qu} mit J_\perp und für $J_2 \gtrsim J_2^*$ nimmt α_{qu} mit J_\perp ab.

Nun sollen die Fälle (iii) und (iv) betrachtet werden, wo die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung $J_1 = -1$, also ferromagnetisch ist. Im Gegensatz zu den antiferromagnetischen Fällen (i) und (ii) ist der Phasenübergang vom kollinearen zum nichtkollinearen Spiralzustand grundsätzlich kontinuierlich. Zur Illustration des kontinuierlichen Verhaltens zeigen die Abbildungen 4.12 und 4.13 die Grundzustandsenergie E in Abhängigkeit des Spiralwinkels sowie die Ket-Korrelationskoeffizienten für den Fall (iii). In Abbildung 4.12 findet man an den Energiekurven für verschiedene Frustrationen J_2 jeweils nur ein ausgeprägtes Minimum, das sich mit wachsendem J_2 kontinuierlich verschiebt. Die Abbildung der Ket-Korrelationskoeffizienten 4.13 zeigt deutliche Unterschiede zur Abbildung 4.9 für den zuvor betrachteten Fall. Bis zum Phasenübergangspunkt J_2^s , der wegen der antiferromagnetischen Zwischenkettenkopplung $J_\perp = 0.3$ gegenüber dem klassischen Fall verschoben ist, (dieses Verhalten wird weiter unten diskutiert) sind die betragsmäßig dominanten Korrelationskoeffizienten a_3 und a_5 . Die letztgenannten Koeffizienten besitzen ein Maximum am Übergangspunkt und nehmen dann monoton ab. Während der Betrag des Korrelationskoeffizienten a_1 und in der Nähe des Übergangspunktes auch der von a_2 stark zunehmen, bleibt a_4 nahe bei Null. Insgesamt ist hierfür erneut der Einfluss von Quantenfluktuationen auf dieses System entscheidend. Für $J_2 < J_2^s$ bei ferromagnetischer Kopplung J_1 ist der Grundzustand der Ketten ein magnetisch ferngeordneter kollinearer Zustand und darüber hinaus frei von Fluktuationen durch die Quantennatur der Spins. Die Hinzunahme einer ferromagnetischen Zwischenkettenkopplung [Fall (iv)] ändert an diesem fluktuationslosen Zustand nichts. Im Fall (iii) werden Quantenfluktuationen durch die Hinzunahme von $J_\perp > 0$ relevant und der Grundzustand wird ein echter Quantengrundzustand. Jedoch ändern sich die magnetischen Korrelationen innerhalb der Ketten kaum. Insgesamt also gibt es am

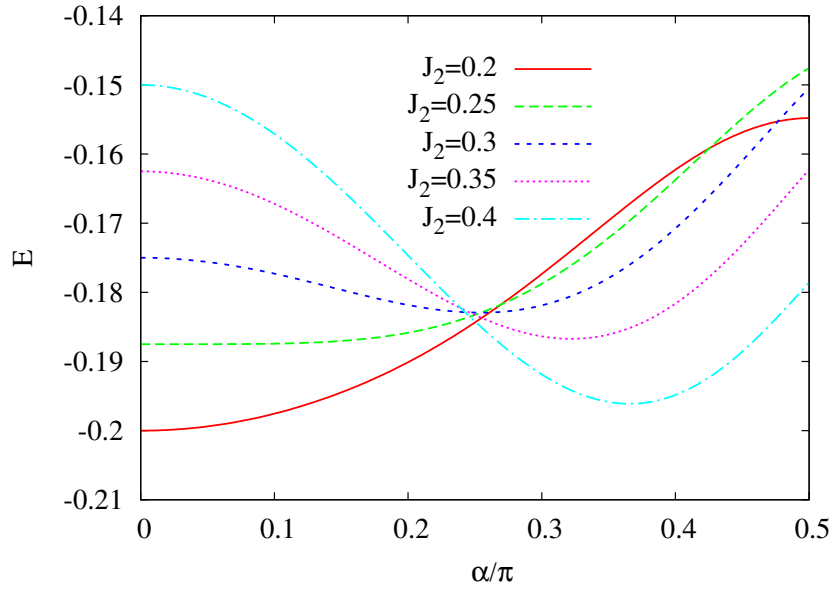


Abbildung 4.12: Darstellung der Grundzustandsenergie E in Abhängigkeit vom Spiralwinkel für verschiedene fixierte J_2 und $J_\perp = 0$ ($J_1 = -1$).

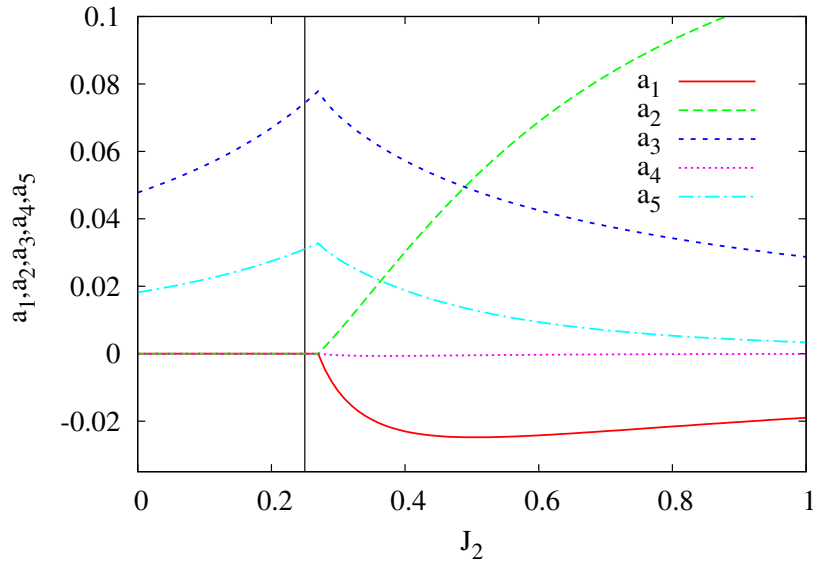


Abbildung 4.13: Darstellung der Ket-Korrelationskoeffizienten für den Fall (iii) und $J_\perp = 0.3$. Bis zum Phasenübergangspunkt bei $J_2^s = 0.27$ sind die Korrelationskoeffizienten a_1, a_2 und a_4 Null und anschließend von Null verschieden, a_4 jedoch betragsmäßig klein. Der klassische Phasenübergangspunkt bei $J_2 = 0.25$ wurde durch eine senkrechte Linie gekennzeichnet.

Phasenübergangspunkt keinen [Fall (iv)] oder nur einen geringen [Fall (iii)] Einfluss von Quantenfluktuationen. Hieraus resultiert, dass der Phasenübergangspunkt für den Fall (iv) exakt bei $J_2 = \frac{|J_1|}{4}$ liegt, jedoch für den Fall (iii) gegenüber dem klassischen Fall verschoben ist und erneut einen *order from disorder*-Effekt anzeigt. Diese Verschiebung ist betragsmäßig klein, weil die Quantenfluktuationen schwach sind. Dennoch kann eine Verschiebung von J_2^s , verursacht durch eine Zwischenkettenkopplung, für die Materialien $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ und Li_2CuO_2 [56, 58], welche nahe am Phasenübergangspunkt liegen, relevant sein. Anzumerken ist, dass in [99] zuerst bemerkt wurde, dass der Übergangspunkt bei $J_2 = \frac{|J_1|}{4}$ fixiert ist, falls der kollineare Zustand der klassische ferromagnetische Zustand ist. Ein ähnliches Übergangsverhalten von diskontinuierlichem zu kontinuierlichem Verhalten ist auch Gegenstand in [100]. Der Quanten-Spiralwinkel für die Fälle (iii) und (iv) ist in den Abbildungen 4.14 und 4.15 dargestellt.

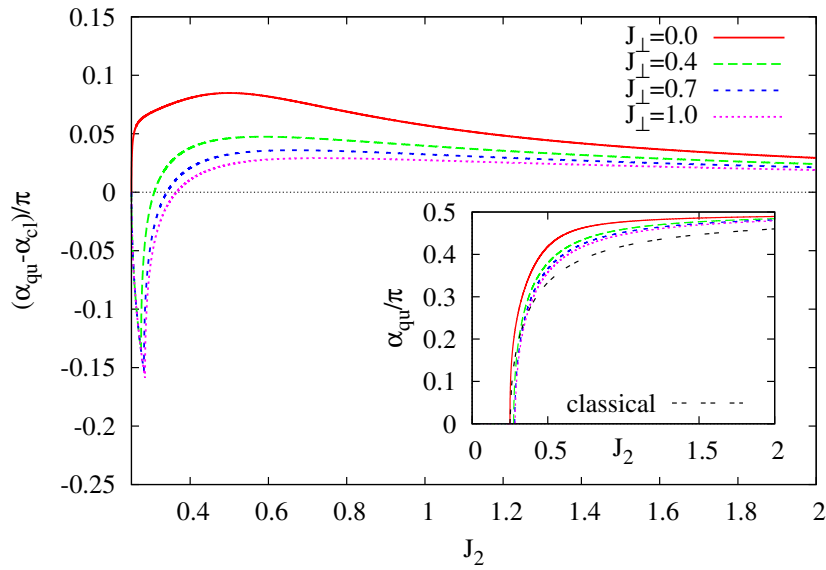


Abbildung 4.14: Darstellung des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} als Funktion von J_2 für ferromagnetische Nächste-Nachbar-Kopplung J_1 und antiferromagnetischer Zwischenkettenkopplung J_\perp [Fall (iii)]. Die Hauptabbildung zeigt hierbei die Differenz zwischen dem Quanten-Spiralwinkel und dem klassischen Spiralwinkel $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$ über J_2 für verschiedene fixierte J_\perp . Im Inset ist α_{qu} selbst als Funktion von J_2 dargestellt. Zum Vergleich wurde der klassische Spiralwinkel als Funktion von J_2 mit eingezeichnet.

Erneut gibt es zwischen dem Verlauf des klassischen Spiralwinkels und des Quanten-Spiralwinkels signifikante Unterschiede, welche jedoch im Vergleich zu den Fällen (i) und (ii) betragsmäßig kleiner ausfallen. Die größte Abweichung für $J_\perp = 0$ von 0.09π findet man bei $J_2 \approx 0.5$. Für den Fall (iv) stellt man fest, dass für $J_\perp \leq 0$ und $J_2 > 0.25$ alle Werte des Quanten-Spiralwinkels größer als die entsprechenden klassischen Werte sind. Für den Fall (iii) führt dagegen die Verschiebung von J_2^s , dargestellt in Abbildung 4.16, zu einer Änderung im Vorzeichen von $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$. Die Quantenfluktuationen, verursacht durch eine antiferromagnetische Kopplung J_\perp , führen also zu einem etwas subtileren Verhalten des entsprechenden Quantensystems. Durch die Verschiebung von J_2^s findet man auch eine recht große Differenz $|\alpha_{qu} - \alpha_{cl}|$ für $J_\perp > 0$ und $J_2 \approx 0.27 - 0.28$.

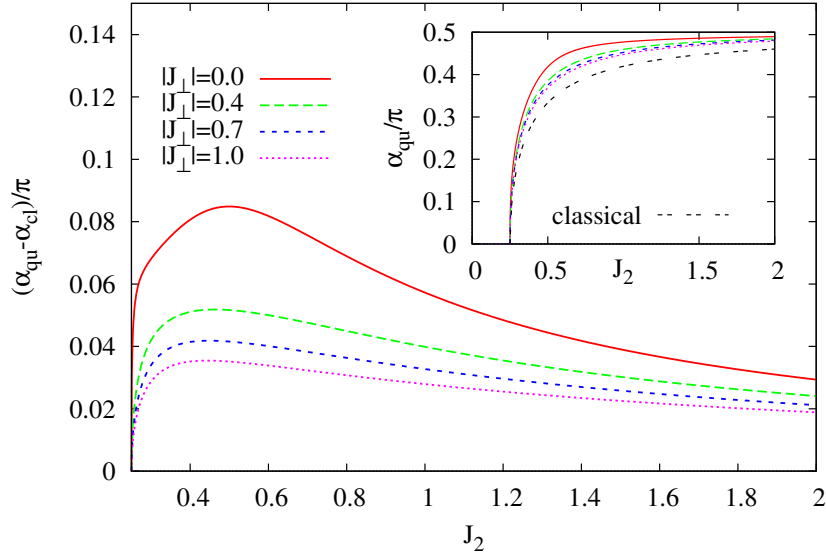


Abbildung 4.15: Darstellung des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} als Funktion von J_2 für ferromagnetische Nächste-Nachbar-Kopplung J_1 und ferromagnetischer Zwischenkettenkopplung J_\perp [Fall (iv)]. Die Hauptabbildung zeigt hierbei die Differenz zwischen dem Quanten-Spiralwinkel und dem klassischen Spiralwinkel $\alpha_{qu} - \alpha_{cl}$ über J_2 für verschiedene fixierte J_\perp . Im Inset ist α_{qu} selbst als Funktion von J_2 dargestellt. Zum Vergleich wurde der klassische Spiralwinkel als Funktion von J_2 mit eingezeichnet.

Erneut findet man für das System mit dem stärksten Einfluss von Quantenfluktuationen (also für $J_\perp = 0$), dass es dem Grenzwert $\alpha_{qu} \rightarrow \frac{\pi}{2}$ am schnellsten zustrebt. Recht große Werte $\left| \frac{J_2}{J_1} \right| \approx 2.4$ findet man z.B. für LiCuVO_4 [51, 54]. Eine Darstellung des Quanten-Spiralwinkels in Abhängigkeit von J_\perp geben die Abbildungen 4.17 [Fall (iii)] und 4.18 [Fall (iv)]. Das Anstiegsverhalten ändert sich für kleine J_\perp am stärksten. Im Gegensatz zu den Fällen (i) und (ii) nimmt α_{qu} monoton mit J_\perp ab, falls $J_2 > J_2^s$. Wie in der Einleitung zu diesem Kapitel angegeben, wurden in [59, 60] lediglich der klassische Zusammenhang zwischen den Austauschwechselwirkungen und dem Spiralwinkel zur Diskussion des Verhältnisses $\frac{J_2}{J_1}$ benutzt. Um hier Abhilfe zu schaffen, wurden empirische Formeln bestimmt, die den kontinuierlichen Teil der Kurven $\alpha_{qu}(J_2)$ (vgl. Abbildungen 4.5, 4.6, 4.10 und 4.14) gut fitten. Da der Verlauf der kontinuierlichen Bereiche von $\alpha_{qu}(J_2)$ dem klassischen Verlauf ähnlich ist, wurde folgender Ansatz zum Fitten der Datenpunkte (geschrieben in Einheiten der Austauschwechselwirkungen zur besseren Anwendung beim Vergleich mit experimentellen Daten) verwendet:

$$\alpha_{qu}(J_2) = \arccos \left(\frac{-J_1}{[4(J_2 - J_2^s + \frac{1}{4})]^\nu} \right). \quad (4.24)$$

In (4.24) ist ν der Fit-Parameter. Für $J_2^s = \frac{|J_\perp|}{4}$ und $\nu = 1$ stimmt diese Gleichung mit der Gleichung (4.3) des klassischen Spiralwinkels überein. In Abbildung 4.19 wurde ν in Abhängigkeit von J_\perp dargestellt (für die Fälle (i)-(iv)). Der so bestimmte Exponent ν ist immer größer als der klassische Wert $\nu_{cl} = 1$. In Übereinstimmung mit den zuvor getroffenen Aussagen nimmt der Exponent ν mit wachsender Zwischenkettenkopplung

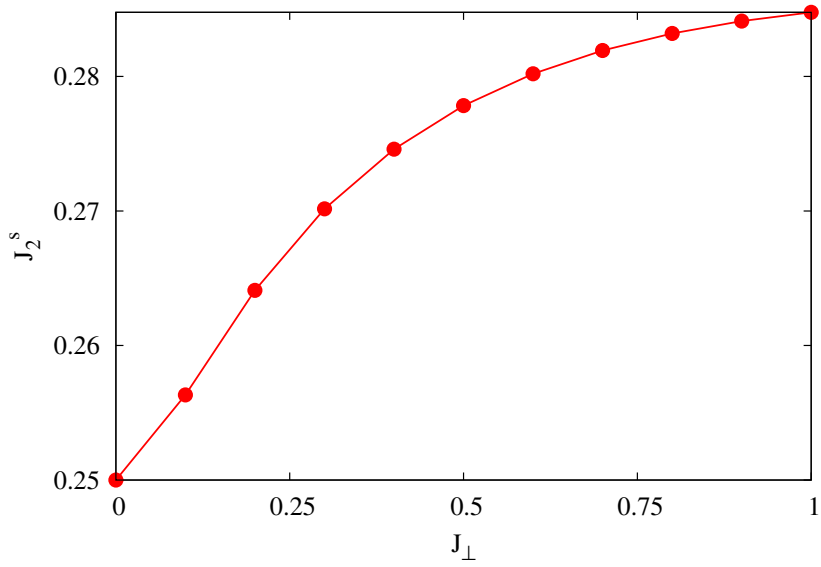


Abbildung 4.16: Diese Abbildung zeigt den Phasenübergangspunkt J_2^s als Funktion von J_{\perp} für $J_1 = -1$ und $J_{\perp} > 0$ [Fall (iii)].

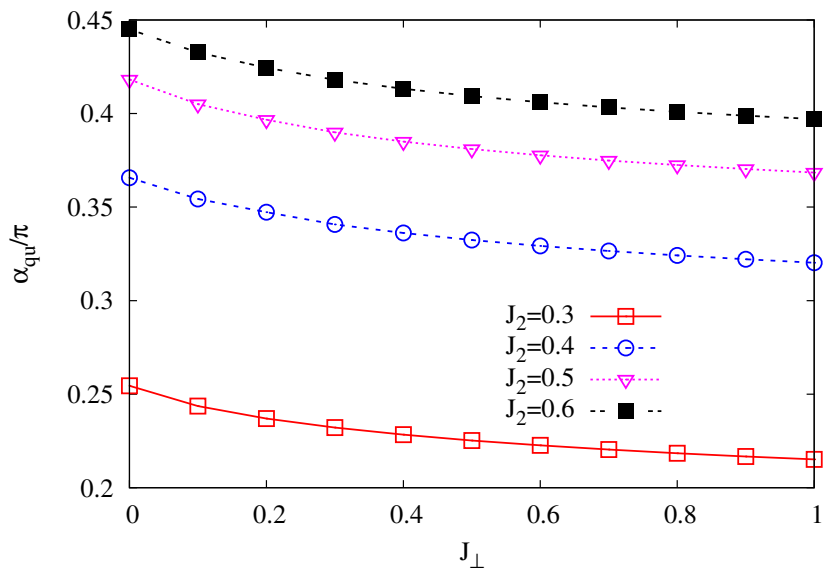


Abbildung 4.17: Illustration des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} als Funktion der Zwischenkettenkopplung J_{\perp} für verschiedene fixierte Werte der Frustration J_2 [Fall (iii)].

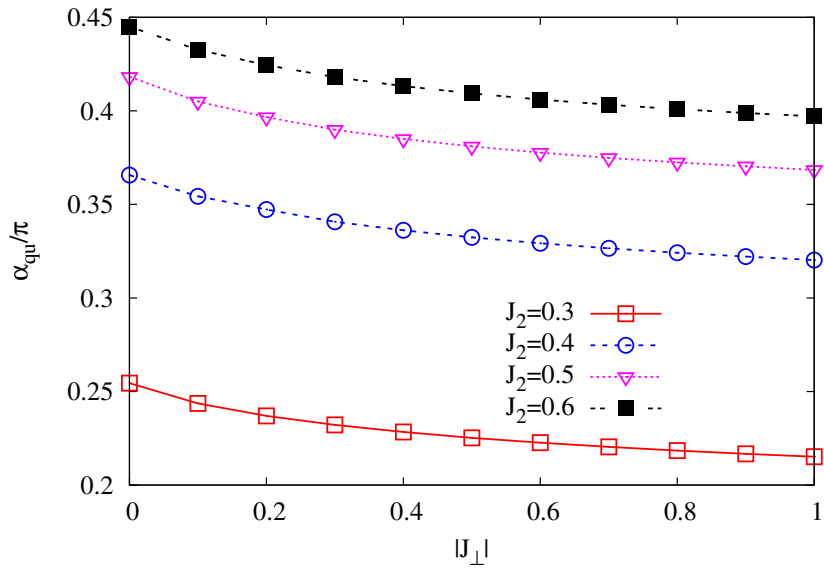


Abbildung 4.18: Illustration des Quanten-Spiralwinkels α_{qu} als Funktion der Zwischenkettencouplung J_{\perp} für verschiedene fixierte Werte der Frustration J_2 [Fall (iv)].

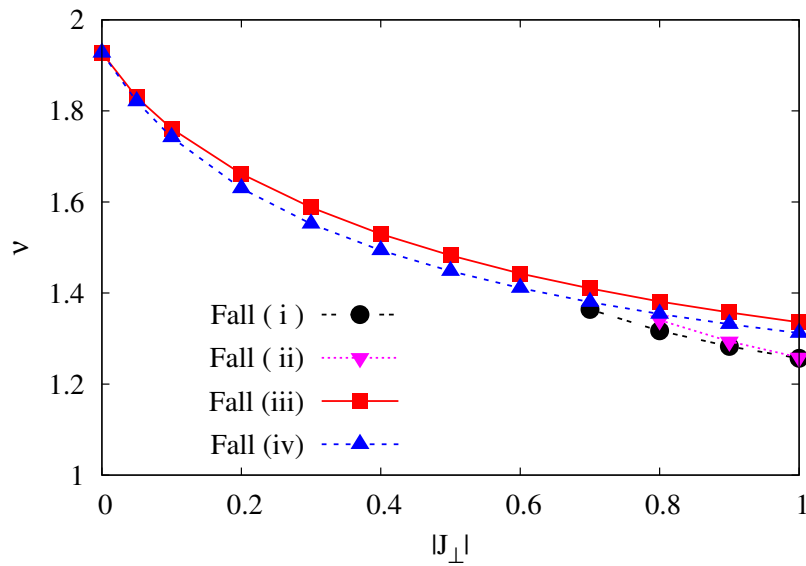


Abbildung 4.19: Darstellung des Exponenten ν in Abhängigkeit von J_{\perp} für die Fälle (i)-(iv).

Tabelle 4.1: Numerische Werte für den Exponenten ν und für den Phasenübergangspunkt J_2^s in Abhängigkeit von J_\perp für die Fälle (i)-(iv).

$ J_\perp $	(i): $J_1 = 1, J_\perp > 0$		(ii): $J_1 = 1, J_\perp < 0$	
	J_2^s	ν	J_2^s	ν
0.70	0.426	1.364	-	-
0.80	0.409	1.317	0.433	1.341
0.90	0.397	1.283	0.418	1.294
1.00	0.386	1.256	0.405	1.258
	(iii): $J_1 = -1, J_\perp > 0$		(iv): $J_1 = -1, J_\perp < 0$	
	J_2^s	ν	J_2^s	ν
0.00	0.250	1.972	0.250	1.972
0.10	0.256	1.761	0.250	1.742
0.20	0.264	1.662	0.250	1.630
0.30	0.270	1.588	0.250	1.552
0.40	0.275	1.530	0.250	1.494
0.50	0.278	1.483	0.250	1.448
0.60	0.280	1.443	0.250	1.411
0.70	0.282	1.410	0.250	1.380
0.80	0.283	1.381	0.250	1.354
0.90	0.284	1.357	0.250	1.331
1.00	0.285	1.336	0.250	1.312

J_\perp ab und nähert sich dem klassischen Wert. Aus experimenteller Sicht sind hier die *edge-shared chain cuprates*, die dem Fall (iii) entsprechen, besonders interessant. Hier können passende Approximationsformeln angegeben werden, die das Verhalten von $J_2^s(J_\perp)$ (siehe Abbildung 4.16) und von $\nu(J_\perp)$ (siehe Abbildung 4.19 (rote Linie)) recht genau fiten:

$$\nu = \frac{a}{\left(\frac{J_\perp}{|J_1|} + b\right)^c}, \quad J_2^s = \frac{|J_1|}{4} + p|J_1| \tanh\left(q \frac{J_\perp}{|J_1|}\right). \quad (4.25)$$

Mit den Werten $a = 1.37$, $b = 0.13$, $c = 0.17$, $p = 0.036$ und $q = 2.11$ erzielen die Kurven sehr gute Übereinstimmungen mit den hier bestimmten Daten für den Fall (iii).

Zusätzlich dazu wurden J_2^s und ν für verschiedene Werte von J_\perp in Tabelle 4.1 eingetragen. Die Approximationsformel (4.25) und die Daten aus der Tabelle können zusammen mit (4.24) verwendet werden, um bei gegebenem Spiralwinkel α (z.B. durch Neutronenstreuung ermittelt [48, 49, 51, 59]) das Verhältnis $\frac{J_2}{J_1}$ zu bestimmen.

Für $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ wurde der Spiralwinkel von ^7Li -NMR-Daten zu $\alpha = 33^\circ \pm 2^\circ$ [57] bestimmt. Das zugehörige klassische Verhältnis ist $\frac{J_2}{J_1} = 0.298$. Dieser Wert ist überraschenderweise recht nah am Wert $\frac{J_2}{J_1} = 0.3$, bestimmt durch thermodynamische Untersuchungen am eindimensionalen Spin- $\frac{1}{2}$ J_1 - J_2 -Modell in [56]. Die Zwischenkettenkopplung wurde bestimmt zu $J_\perp \lesssim 0.1J_1$. Die hier durchgeführten Untersuchungen würden für $\frac{J_2}{J_1} = 0.3$, entsprechend Abbildung 4.16, einen etwas größeren Spiralwinkel von $\alpha \approx 42^\circ$ vermuten lassen. Für dieses Material sind jedoch vermutlich nennenswerte Anisotropien relevant, welche zu einer Modifikation des Spiralwinkels und zu einer Reduktion der Quantenfluktuationen im Vergleich zum hier untersuchten isotropen

Modell führen. Mit diesen Anisotropien im Zusammenhang stehende Effekte wurden jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht untersucht.

4.4 Ergebnisse für das frustrierte quasi-1d J_1 - J_2 -Modell in höheren LSUBn

In diesem Abschnitt erfolgt die Untersuchung des quasi-1d J_1 - J_2 -Systems unter Verwendung des Néel-Zustandes als CCM-Modellzustand und unter Auswertung hoher Näherungsstufen. Wie in der Einleitung zu diesem Kapitel angegeben, stehen folgende Fragestellungen im Vordergrund:

1. Gibt es im unfrustrierten System ($J_2 = 0$) in Abhängigkeit vom Quantenspin s für $J_\perp > 0$ eine ungeordnete Phase?
2. Wie ändert sich diese Situation bei Hinzunahme einer Frustration J_2 ?

Zur Untersuchung dieser Fragestellungen steht in diesem Abschnitt der Ordnungsparameter M , berechnet nach (2.15), im Vordergrund. Im Abschnitt 2.3.8 wurde bereits angegeben, dass im Rahmen der CCM hohe Genauigkeiten durch eine passende Extrapolation der Ergebnisse aus Berechnungen bis zu hohen $SUBn - n$ -Näherungsstufen erreicht werden. In der praktischen Umsetzung bedeutet dies, dass man die zur Verfügung stehenden Computerkapazitäten ausschöpft (vgl. auch Kapitel 3). An zuvor untersuchten Systemen [25, 29, 30], die einen Quantenphasenübergang von einem ungeordneten zu einem geordneten Grundzustand zeigen, erwies sich die Potenzgesetz-Extrapolation "Extrapolation1" (2.59) als erfolgreich zur Bestimmung des Phasenübergangspunktes. Alternativ hierzu wurde in Abschnitt 2.3.8 begründet, dass innerhalb der Potenzgesetz-Extrapolation ein Fixieren des Exponenten unter Hinzunahme eines weiteren Termes höherer Ordnung in $\frac{1}{n}$ für einen stabilen Fit günstig sein kann, was auf "Extrapolation3" (2.61) führte. Beide Extrapolationen wurden zunächst verwendet, um die $SUBn - n$ -Ergebnisse des Ordnungsparameters der einfachen linearen Kette ($s = \frac{1}{2}$) am kritischen Punkt zu extrapolieren (vgl. auch Tabelle 3.1 und Abbildung 3.2). Das exakte Resultat $M = 0$ wird dabei sehr genau wiedergegeben. Die Kurven sind in Abbildung 4.20 dargestellt. Der Koeffizient a_2 aus (2.59) wurde hierbei bestimmt zu $a_2 = 0.414$, was relativ nahe am fixierten Exponenten $\frac{1}{2}$ aus (2.61) ist. Im Folgenden werden beide Extrapolationen verwendet, um die kritische Zwischenkettenkopplung J_\perp^c zu bestimmen. Die Differenz der so bestimmten extrapolierten Werte für J_\perp^c kann man gewissermaßen als Genauigkeit der Methode auffassen.

Die Computerressourcen der für diese Arbeit verfügbaren Parallelrechner erlaubten hierbei die Berechnung bis zu $SUB10 - 10$ für das Spin- $\frac{1}{2}$ -System und bis zu $SUB8 - 8$ für das Spin-1-System, was die Bestimmung und die numerisch-iterativen Lösung von mehr als 10^4 gekoppelten (nichtlinearen) Gleichungen bedeutet.

Die Ergebnisse für den Ordnungsparameter $\frac{M}{s}$ in Abhängigkeit von der Zwischenkettenkopplung sowie die entsprechenden Extrapolationen sind in den Bildern 4.21-4.23 dargestellt. Für das quasi-eindimensionale unfrustrierte Spin- $\frac{1}{2}$ -System erkennt man in Abbildung 4.21, dass sich die Magnetisierung im Bereich $J_1 \geq J_\perp \gtrsim 0.2J_1$ kaum ändert. Lediglich für $J_\perp < 0.2J_1$ nimmt die Magnetisierung merklich ab. Man erkennt auch, dass beide Extrapolationen zu nahezu identischen Extrapolationswerten führen. Die Extrapolation entsprechend (2.59), ergibt eine kritische Zwischenkettenkopplung von

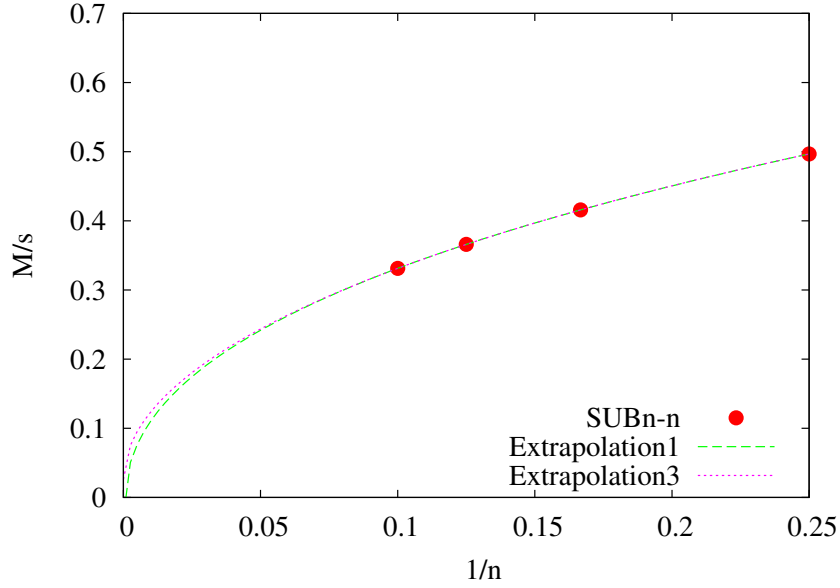


Abbildung 4.20: Darstellung der Extrapolation des Ordnungsparameters (Untergitter-Magnetisierung) M , skaliert mit dem Quantenspin s für die pure unfrustrierte $s = \frac{1}{2}$ -Kette ($J_2 = 0$, $J_\perp = 0$). Die verwendeten Extrapolationsmethoden sind mit Extrapolation1 (Extrapolation nach (2.59)) und mit Extrapolation3 (Extrapolation nach (2.61)) bezeichnet.

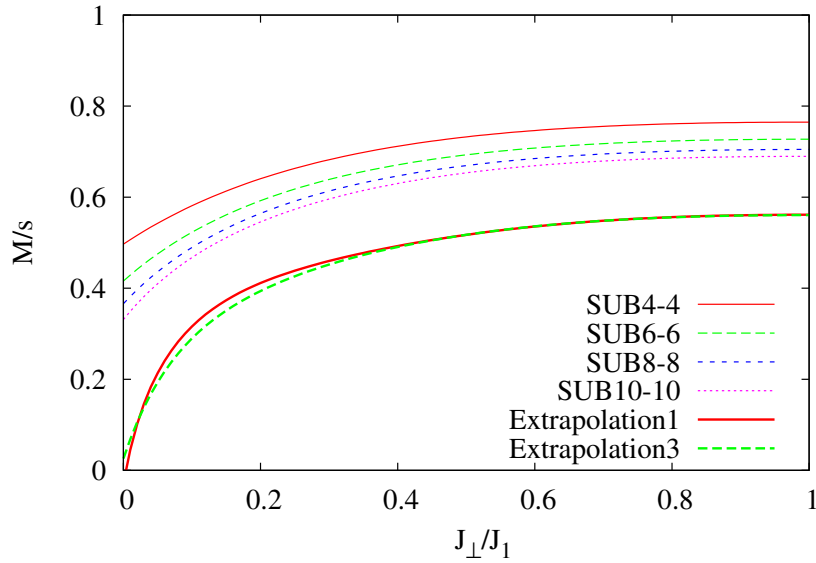


Abbildung 4.21: Darstellung der Abhängigkeit des Ordnungsparameters im Grundzustand (Untergittermagnetisierung) M/s von der Zwischenkettenkopplung J_\perp für den unfrustrierten quasi-1d Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Antiferromagneten. Die verwendeten Extrapolationsmethoden sind mit Extrapolation1 (Extrapolation nach (2.59)) und mit Extrapolation3 (Extrapolation nach (2.61)) bezeichnet.

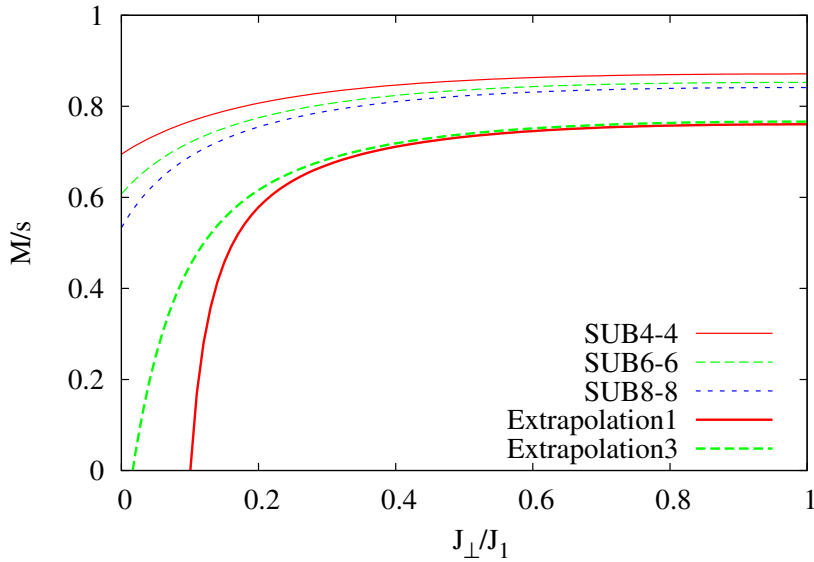


Abbildung 4.22: Darstellung der Abhängigkeit des Ordnungsparameters im Grundzustand (Untergittermagnetisierung) M/s von der Zwischenkettenkopplung J_{\perp} für den unfrustrierten quasi-1d Spin-1 Heisenberg-Antiferromagneten. Die verwendeten Extrapolationsmethoden sind mit Extrapolation1 (Extrapolation nach (2.59)) und mit Extrapolation3 (Extrapolation nach (2.61)) bezeichnet.

$J_{\perp}^c \approx 0.003J_1$, unterhalb derer die Néel-Ordnung verschwindet. Die Extrapolation nach (2.61) führt zu einem endlichen, jedoch sehr kleinen Ordnungsparameter $M \approx 0.01$. Diese Ergebnisse sind konsistent mit der Schlussfolgerung, dass für das unfrustrierte Spin- $\frac{1}{2}$ -System eine infinitesimal kleine Zwischenkettenkopplung genügt, um eine antiferromagnetische langreichweitige Ordnung im Grundzustand zu stabilisieren. Dieses Ergebnis stimmt mit den Ergebnissen aus [75, 79, 80, 81, 82] überein. Als Ursache ist das Fehlen eines Spingaps in diesem System zu nennen.

Nun soll das analoge $s = 1$ -System untersucht werden. Die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen wächst nach Abschnitt 2.3.4 für das Spin-1-System erheblich rascher, als für das entsprechende Spin- $\frac{1}{2}$ -System, weswegen die Berechnungen nur bis einschließlich $SUB8 - 8$ durchgeführt werden konnten. Daraus resultierend sind die Aussagen der CCM nicht ganz so zuverlässig wie für $s = \frac{1}{2}$.

Erneut ändert sich, wie Bild 4.22 zeigt, die Magnetisierung im Bereich $J_1 \geq J_{\perp} \gtrsim 0.2J_1$ kaum. Der Betrag der Magnetisierung ist jedoch erheblich höher als im Spin- $\frac{1}{2}$ -System, was einer Abnahme der Quantenfluktuationen in diesem System mit wachsendem Quantenspin s zuzuschreiben ist. Eine starke Abnahme des Ordnungsparameters beginnt für $J_{\perp} \lesssim 0.2J_1$, bis die Magnetisierung schließlich bei einer endlichen Zwischenkettenkopplung $J_{\perp}^c > 0$ völlig verschwindet. Dies ist gleichbedeutend mit der Feststellung, dass in diesem System eine endliche Zwischenkettenkopplung für einen ferngeordneten Grundzustand nötig ist.

Beide Extrapolationen zeigen jedoch größere Abweichungen zueinander als für das Spin- $\frac{1}{2}$ -System. Die Extrapolation nach (2.59) ergibt $J_{\perp}^c \approx 0.1J_1$ und die Extrapolation nach (2.61) den kleineren Wert $J_{\perp}^c \approx 0.02J_1$. Beide Werte weichen etwa um den Faktor 2 von den QMC Ergebnissen [82, 83, 84] $J_{\perp}^c \approx 0.043 - 0.044J_1$ ab und geben einen Rück-

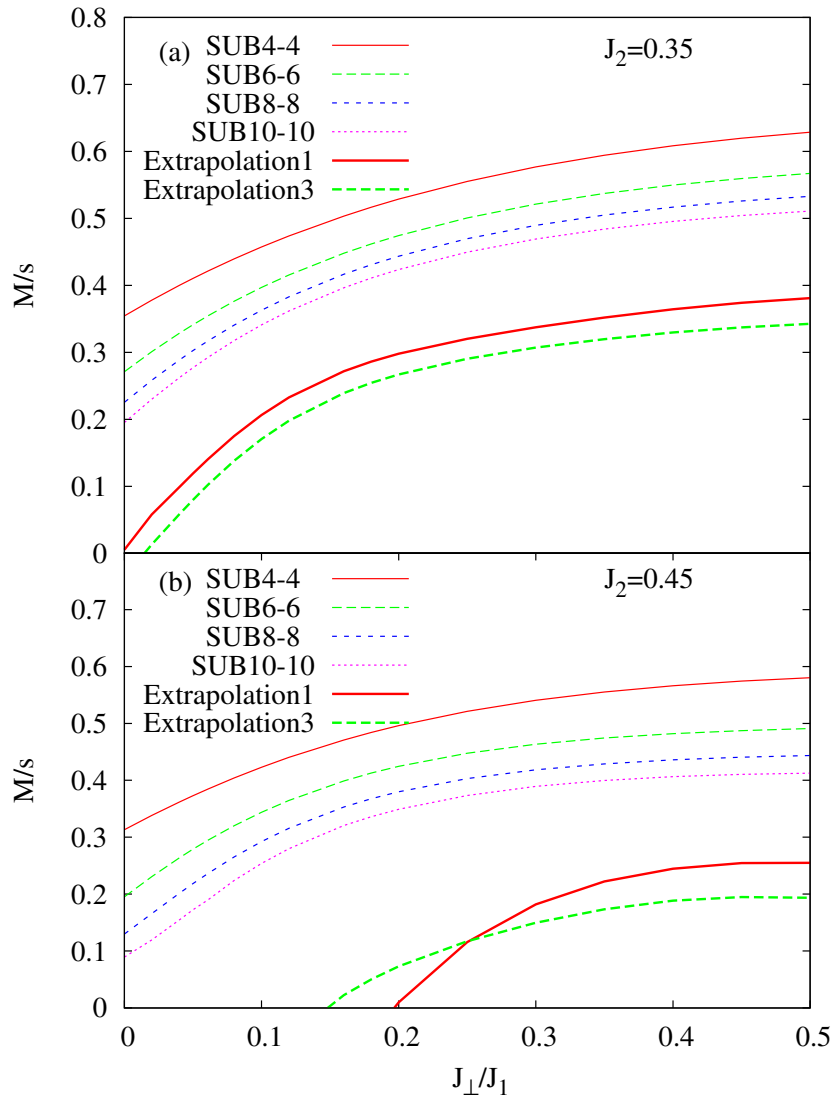


Abbildung 4.23: Darstellung der Abhängigkeit des Ordnungsparameters im Grundzustand (Untergittermagnetisierung) M/s von der Zwischenkettenkopplung J_{\perp} für den frustrierten quasi-1d Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Antiferromagneten. Die verwendeten Extrapolationsmethoden sind mit Extrapolation1 (Extrapolation nach (2.59)) und mit Extrapolation3 (Extrapolation nach (2.61)) bezeichnet. Abbildung a: $J_2 = 0.35J_1$; Abbildung b: $J_2 = 0.45J_1$.

schluss auf die Genauigkeit der CCM bei Verwendung der Daten bis einschließlich der Näherungsstufe *SUB8* – 8.

Wegen der Frustration sind QMC Rechnungen für das nun betrachtete frustrierte quasi-eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ -System nicht möglich. Im Abschnitt 4.2 wurde der klassische Grundzustand genauer betrachtet. Für $J_2 > 0.25J_1$ liegt ein inkommensurabler Grundzustand mit spiralförmigen Korrelationen entlang der Ketten vor, unabhängig von der Größe der Zwischenkettenkopplung. Im Unterschied zum klassischen System zeigt das eindimensionale Quantensystem keine spiralförmige Korrelationen für $0.25J_1 < J_2 \lesssim 0.5J_1$ [25, 70, 62, 64, 65], jedoch ein Spingap ϵ , das eine starke Abhängigkeit von J_2 aufweist [64, 101]. In Anwesenheit einer genügend starken Zwischenkettenkopplung J_\perp können jedoch auch im Quantenmodell spiralförmige Korrelationen auftreten [25, 70]. Man betrachte hierzu die Abbildung 4.10 und beachte auch die Aussagen des vorigen Abschnittes. Die hier durchgeführten Berechnungen wurden deshalb auf die Bereiche $J_\perp < 0.5J_1$ und $J_2 \leq 0.46J_1$ beschränkt. Die Untersuchungen des Abschnittes 4.3 zeigen, dass die Verwendung des Néel-Zustandes als CCM-Modellzustand hier gut funktioniert und motiviert ist. Das Spingap ϵ ist für den Bereich $J_2 < 0.4J_1$ im eindimensionalen Modell ($J_\perp = 0$) sehr klein und wächst rasch im Intervall $0.4J_1 < J_2 < 0.5J_1$ [64, 101].

Die Ergebnisse für $\frac{M}{s}$ als Funktion von J_\perp für $J_2 = 0.35J_1$ und für $J_2 = 0.45J_1$ sind in Abbildung 4.23 dargestellt. Für $J_2 = 0.35J_1$ beträgt der kritische Wert für die Zwischenkettenkopplung nach Extrapolation mit (2.59) $J_\perp^c \approx 0$ und nach Extrapolation mit (2.61) $J_\perp^c = 0.014J_1$. Aufgrund des sehr kleinen Wertes des Spingaps für $J_2 = 0.35J_1$ und $J_\perp = 0$, ist eine verschwindende oder ebenfalls kleine kritische Zwischenkettenkopplung J_\perp^c plausibel. Für $J_2 = 0.45J_1$, wo das Spingap $\epsilon \approx 0.13J_1$ beträgt [64, 65], wurde jedoch eine recht große kritische Zwischenkettenkopplung $J_\perp^c \approx 0.2J_1$ (nach (2.59)) bzw. $J_\perp^c \approx 0.15J_1$ (nach (2.61)) bestimmt. Interessanterweise scheint das Verhältnis $R = \frac{J_\perp^c}{\epsilon}$, größer als für den unfrustrierten Spin-1-Antiferromagneten zu sein. In Figur 4.24 ist die kritische Zwischenkettenkopplung J_\perp^c in Abhängigkeit von J_2 dargestellt. Beide Extrapolationen liefern hier ähnliche Resultate. Man erkennt, dass sich J_\perp^c in Abhängigkeit von J_2 ähnlich zum Verlauf des Spingaps ϵ in Abhängigkeit von J_2 verhält [64, 65]. Man findet dennoch eine monotone Zunahme des Verhältnisses $R = \frac{J_\perp^c}{\epsilon}$ von $R \approx 0.8$ zu $R \approx 1.6$ in der Region $0.4J_1 \leq J_2 \leq 0.46J_1$.

Der Ordnungsparameter $\frac{M}{s}$ als Funktion der Frustration J_2 ist in Abbildung 4.25 dargestellt. Um diese Abbildung übersichtlich zu halten, wurden nur die extrapolierten Werte nach (2.59) eingetragen. Wie erwartet, schwächt die Frustration die magnetische Ordnung im Grundzustand, d.h. $\frac{M}{s}$ nimmt mit wachsendem J_2 ab.

Für fixierte und nicht zu große Zwischenkettenkopplungen J_\perp beobachtet man in diesem System einen Quantenphasenübergang von einem ferngeordneten Néel-Zustand zu einer ungeordneten Phase in Abhängigkeit von J_2 . In Analogie zum quasi-2d $J_1 - J_2$ Modell [30] ist es sehr wahrscheinlich, dass es für starke Zwischenkettenkopplungen keine magnetisch ungeordnete Phase gibt.

Abschließend soll erwähnt werden, dass dieser Quantenphasenübergang im betrachteten Modell auch aus einem anderen Blickwinkel von großem Interesse ist. Für $0.2411J_1 < J_2 \lesssim 0.5J_1$ besitzt dieses Modell zwei Grundzustände, welche unterschiedliche Symmetrien brechen. Die rotationsinvariante, dimerisierte Phase für verschwindende oder kleine J_\perp bricht die Translationssymmetrie des Gitters und die néelartig geordnete Phase bricht die Spinrotationssymmetrie. Einen kontinuierlichen Phasenübergang kann es im Rahmen der Landau-Theorie nicht geben und könnte nur durch eine darüber hinausge-

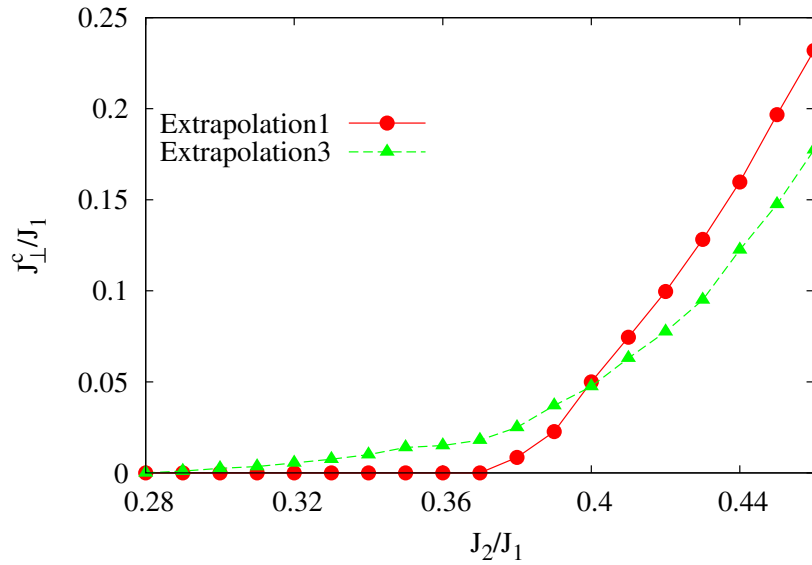


Abbildung 4.24: Darstellung der kritischen Zwischenkettenkopplung J_{\perp}^c in Abhängigkeit von J_2 für das frustrierte quasi-eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ -System. Die verwendeten Extrapolationsmethoden sind mit Extrapolation1 (Extrapolation nach (2.59)) und mit Extrapolation3 (Extrapolation nach (2.61)) bezeichnet.

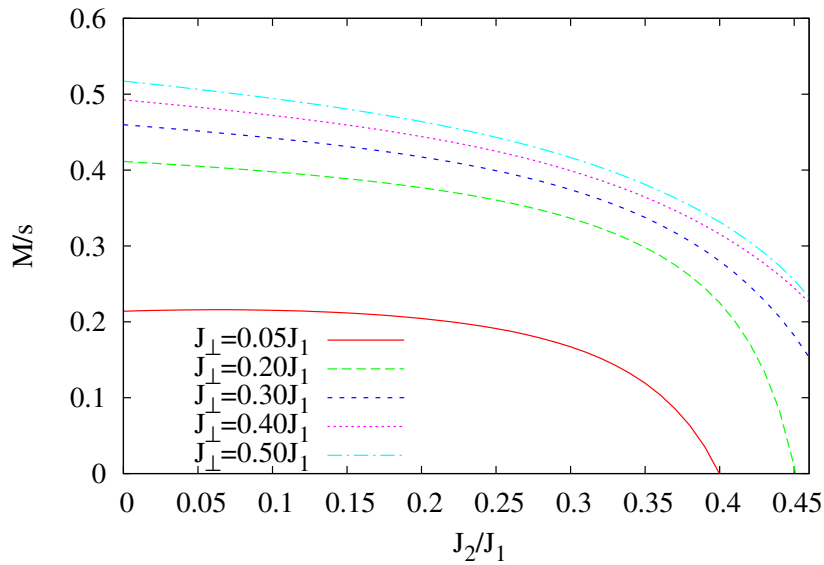


Abbildung 4.25: Darstellung des Ordnungsparameters M/s in Abhängigkeit von J_2 für verschiedene fixierte Werte der Zwischenkettenkopplung J_{\perp} für das frustrierte quasi-eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ -System. Die Daten hierzu sind durch Verwendung der Extrapolation nach (2.59) ermittelt.

hende Theorie (*deconfined quantum criticality*) erklärt werden. [102]. Für dieses System sind somit die drei folgenden Szenarien denkbar:

1. es gibt eine kleine ungeordnete, spinflüssigkeitsartige Zwischenphase,
2. es findet ein Phasenübergang erster Ordnung zwischen dem Néel-Zustand und dem dimerisierten Zustand statt,
3. das System besitzt einen sogenannten *deconfined quantum critical point* [102].

Diese Fragestellung kann im Rahmen dieser Untersuchung nicht beantwortet werden, wird jedoch Gegenstand künftiger Untersuchungen sein.

Kapitel 5

Untersuchung unfrustrierter und frustrierter Spin-Gitter im Magnetfeld

Im Kapitel 4 wurden quasi-eindimensionale und zweidimensionale (frustrierte) Quantenspinsysteme im Rahmen der CCM untersucht. Diese Untersuchungen wurden durch die starke Beeinflussbarkeit dieser Systeme durch Quantenfluktuationen und ihrer komplexen Dynamik motiviert.

Gegenstand dieses Kapitels ist die Untersuchung des Verhaltens zweier Quanten-Antiferromagnete in Anwesenheit eines äußeren magnetischen Feldes. Waren die Untersuchungen solcher Systeme zunächst von generellem Interesse für die Beantwortung allgemeiner physikalischer Fragestellungen, so wurden diese Systeme mit der Entdeckung exotischer Magnetisierungskurven (Plateaus, Sprünge) in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld erneut verstärkt untersucht [1, 69, 103, 104, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 115, 116]. Diese Plateaus und Sprünge sind oft an den Quantencharakter der Systeme gekoppelt, weil sie in den korrespondierten klassischen Systemen nicht zu finden sind [69, 117, 118, 119].

Die hier betrachteten Modellsysteme sind der Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagnet auf dem unfrustrierten, isotropen Quadratgitter und auf dem frustrierten Dreiecksgitter. Diese Modelle wurden mit verschiedenen Quanten-Vielteilchen-Methoden wie der QMC, der ED, mit feldtheoretischen Methoden, der SWT und mittels starker-Kopplungs-Approximationen [1, 103, 104, 105, 106] bereits untersucht. Auf die hierbei unumgänglichen Limitierungen einiger Methoden wurde im Abschnitt 2.2 eingegangen.

Hier werden erstmalig CCM-Berechnungen hin zu hohen Näherungsstufen durchgeführt. Das Kapitel selbst ist dabei folgendermaßen gegliedert: Zunächst werden die Hamilton-Operatoren angegeben und die klassischen Eigenschaften beider Systeme kurz rekapituliert. Dann werden Ergebnisse älterer Untersuchungen der Quantenmodelle zusammengetragen. Die neuen CCM-Berechnungen am unfrustrierten Quadratgitter und eine detaillierte Präsentation der gewonnenen Resultate erfolgt im Abschnitt 5.1. Die entsprechende Untersuchung des frustrierten Dreiecksgitters erfolgt anschließend im Abschnitt 5.2. Die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels sind Gegenstand der Veröffentlichung [120].

Der relevante Hamilton-Operator beider Systeme kann geschrieben werden zu:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \lambda \sum_i s_i^z. \quad (5.1)$$

Der Index i kennzeichnet hierbei einen beliebigen Gitterplatz und $\langle i, j \rangle$ kennzeichnet eine Summation über alle Nächste-Nachbar-Bindungen (einfach gezählt) der jeweiligen Gitter. Die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung ist fixiert zu $J = 1$ (wurde deshalb weggelassen) und $\lambda = \frac{h}{J}$. Die Stärke des angelegten Magnetfeldes wird damit durch λ gegeben.

Die Quantengrundzustände sind bei $\lambda = 0$ bis auf eine Abschwächung durch Quantenfluktuationen vergleichbar zum klassischen Modell geordnet. Der klassische Grundzustand des Quadratgitters ist entsprechend der antiferromagnetischen Wechselwirkung der Néel-Zustand. Eine entsprechende Anordnung der Spins im Dreiecksgitter ist wegen der Frustration nicht möglich. Die Spins richten sich klassisch im Winkel von 120° zueinander aus.

Nach Anlegen eines magnetischen Feldes, beginnen sich die Spins in Richtung des Feldes zu verdrehen, bis sie schließlich bei einer Sättigungsfeldstärke von $\lambda = 4$ für das Quadratgitter bzw. bei $\lambda = 4.5$ für das Dreiecksgitter alle in Feldrichtung weisen. Im Sättigungspunkt ist die Magnetisierung maximal (M_s , vgl. (5.3)).

Das Verhalten des Quadratgitters unter Beachtung der Quanteneigenschaften [1, 103, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127] entspricht in etwa dem klassischen System. Wie schon angegeben, modifizieren Quantenfluktuationen das Verhalten leicht. Ergebnisse aus der SWT in 2. und 3. Ordnung [123, 124, 125] sowie Ergebnisse, bestimmt mit ED und QMC [1, 126], geben eine gute Übersicht über das Verhalten des Quantensystems. In [126, 127] wurden darüber hinaus zu diesem System vor kurzem Größen wie die Spinsteifigkeit, die Spinwellengeschwindigkeit und die magnetische Suszeptibilität mittels ED und SWT bestimmt. Eine gute Übersicht zum Verhalten des Quadratgitters und zu den ermittelten Größen im magnetischen Feld findet man in [72].

Zum Teil völlig gegensätzlich zum klassischen System verhält sich das Quantenmodell des Dreiecksgitters im Magnetfeld [103, 106, 107, 108, 109, 112, 128, 129]. So findet man zum Beispiel ein Plateau in der Magnetisierungskurve bei $\frac{M}{M_s} = \frac{1}{3}$ innerhalb einer begrenzten Region von λ . Die Ausdehnung dieses Plateaus wurde mittels der SWT zu $1.248 < \lambda < 2.145$ [108, 109] und mittels der ED zu $1.38 < \lambda < 2.16$ [1, 103, 106, 107, 108, 109, 112, 128, 129] bestimmt. Wegen der mit der Frustration zusammenhängenden Einschränkungen der QMC gibt es von dieser sonst sehr präzisen Methode keine Vergleichswerte. Darüber hinaus weichen die ED- und die SWT-Ergebnisse merklich voneinander ab und erscheinen deshalb weniger genau. Die Untersuchung mit weiteren Methoden ist somit wünschenswert.

Des Weiteren geben aktuelle Experimente an Cs_2CuBr_4 [116] Hinweise auf weitere Plateaus bei $\frac{M}{M_s} = \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{5}{9}$, und $\frac{2}{3}$. In [116] wurde vermutet, dass dies mit einer unterschiedlichen Größe der magnetischen Elementarzellen zusammenhängt (jedes Plateau korrespondiert dann zu einer speziellen Elementarzellengröße). Theoretisch wurde bisher jedoch nur das $\frac{M}{M_s} = \frac{1}{3}$ -Plateau gefunden. Die Klärung der Frage nach weiteren Plateaus erfolgt allerdings nicht innerhalb der hier durchgeführten Untersuchungen.

5.1 Unfrustriertes Quadratgitter im Magnetfeld

Zu Beginn der CCM-Untersuchungen stellt sich die Frage nach einem geeigneten Modellzustand. Für das *bipartite* Quadratgitter wird erneut, wie im Kapitel 4, ein Modellzustand mit einem freien Parameter (Winkel θ) gewählt. Dieser Modellzustand beinhaltet den klassischen Grundzustand (Néel-Zustand) als Spezialfall ($\theta = 0$). Der

Quantenwinkel θ wird durch Minimierung der Grundzustandsenergie bestimmt. Im Bild 5.1 ist eine Illustration des Modellzustandes abgebildet. Wie in der analytischen

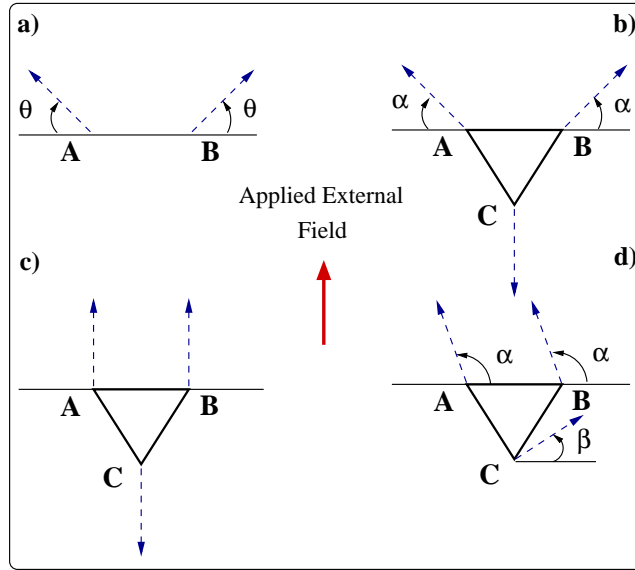


Abbildung 5.1: Illustration der Modellzustände für die CCM-Berechnungen am Quadratgitter und am Dreiecksgitter. a) illustriert den Modellzustand für das Quadratgitter. θ ist hierbei der Winkel zwischen den Spins und der x -Achse. b) zeigt den Modellzustand I für das Dreiecksgitter. Die Spins in den Untergittern A und B schließen mit der x -Achse den Winkel α ein, während der Spin im Untergitter C ein fixierter Down-Spin ist. Der Modellzustand II für das Dreiecksgitter ist in c) dargestellt. Die Spins in den A- und B-Untergittern sind Up-Spins und der Spin im Untergitter C ist erneut ein Down-Spin. Alle Spins sind in ihren Richtungen fixiert. d) illustriert den Modellzustand III des Dreiecksgitters. Die Spins in den Untergittern A und B schließen mit der x -Achse den Winkel α ein, während der Spin im Untergitter C mit der x -Achse den Winkel β einschließt. Der Modellzustand II ist somit als Spezialfall in den Modellzuständen I und III enthalten.

Beispielrechnung begründet und demonstriert wurde, führt die Koordinatentransformation des Hamilton-Operators (5.1), entsprechend (2.22), für diesen Modellzustand auf:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\langle i \rightarrow j \rangle} \left\{ -\frac{1}{4}(1 + \cos(2\theta))(s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-) + \frac{1}{4}(1 - \cos(2\theta))(s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+) \right. \\
 &\quad \left. - \cos(2\theta) s_i^z s_j^z + \frac{1}{2} \sin(2\theta)(s_i^z s_j^+ + s_i^z s_j^- - s_i^+ s_j^z - s_i^- s_j^z) \right\} \\
 &\quad + \lambda \sin(\theta) \sum_i s_i^z - \frac{\lambda}{2} \cos(\theta) \sum_{i_A} (s_{i_A}^+ + s_{i_A}^-) + \frac{\lambda}{2} \cos(\theta) \sum_{i_B} (s_{i_B}^+ + s_{i_B}^-). \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

Man beachte, dass in (2.22) $\alpha = \pi - 2\theta$ zu berücksichtigen ist, wegen der unterschiedlichen Definitionen der Winkel α und θ (hierzu siehe auch Bild 5.1). In (5.2) haben, wegen der antisymmetrischen Sinusfunktion, die Terme $s^z s^+$ und $s^z s^-$ für eine Bindung von i nach j ein anderes Vorzeichen, als für eine Bindung von j nach i . Diese Besonderheit ist in der genannten Gleichung durch den Pfeil in der Symbolik $\langle i \rightarrow j \rangle$ gekennzeichnet.

Im für diese Arbeit verwendeten numerischen Programmpaket wird dies durch eine sogenannte *bond directionality* bei der Programmierung berücksichtigt. Ein illustratives Beispiel dieser *bond-directionality* für das Quadratgitter ist in Abbildung 5.2 gegeben. Des Weiteren kennzeichnet der Index i_A eine Summation über alle Gitterplätze des A -

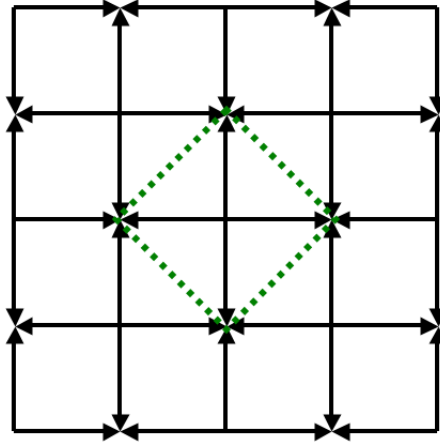


Abbildung 5.2: Illustration der *bond-directionality* des Quadratgitters nach der lokalen Koordinatentransformation. Die systematisch auf dem Gitter eingezeichneten Bindungsrichtungen werden dabei durch die Pfeilrichtungen angezeigt. Die gestrichelten Linien zeigen die Zweispin-Elementarzelle des Modells.

Untergitters, der Index i_B selbiges für das B -Untergitter und der Index i kennzeichnet einen beliebigen Gitterplatz. Wegen des verwendeten Modellzustandes sind zwei benachbarte Spins nicht mehr äquivalent. Die Elementarzelle, ebenfalls in Abbildung 5.2 zu sehen, beinhaltet nun zwei Spins. Ebenso ist die Größe $s_T^z \neq 0$, außer für $\lambda = 0$ und $\theta = 0$. Wegen der vergrößerten Elementarzelle und wegen $s_T^z \neq 0$, ist die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen größer als für das einfache Quadratgitter (man beachte hierzu auch Kapitel 3). Die CCM-Simulationen für das hier betrachtete Modell sind somit entsprechend anspruchsvoller. Ein weiterer wichtiger Punkt ist der Ausschluss der CCM *LSUB1*-Konfigurationen für die hier durchgeführten Simulationen. In Kapitel 4 konnte für das dort betrachtete Modell innerhalb einer analytischen Rechnung gezeigt werden, dass die einzig physikalisch vernünftige Lösung für den *LSUB1*-Koeffizienten Null ist. In numerischen Simulationen erhielt man darüber hinaus ebenfalls immer die Null für diese Koeffizienten bzw. die iterativen Lösungsverfahren konvergierten gegen diese Lösung. Für das Quadratgitter im Magnetfeld erwies sich die Fragestellung, ob die *LSUB1*-Korrelationskoeffizienten mit einbezogen werden müssen, als schwieriger. Die *LSUB1*-Terme sind Terme der Form $S_{i_1} s_{i_1}^+$ und nach [9] sind diese Terme in den Bra- und Ket-Zuständen äquivalent zu einer Spinachsenrotation. Für $s = \frac{1}{2}$ gilt $(s_i^+)^2 |\Phi\rangle = 0$ und man kann zeigen, dass $e^{S_1} = \prod_i (1 + S_{i_1} s_{i_1}^+)$ gilt. Dies stellt eine Mischung aus Up- und Down-Spins an jedem Gitterplatz dar und verdeutlicht die Analogie zu einer Rotation der Achsen. In zuvor durchgeführten Untersuchungen desselben Modells im Magnetfeld [9] wurde explizit angenommen, dass die *LSUB1*-Terme Null gesetzt werden können. Für die hier durchgeführten Untersuchungen zu deutlich höheren Näherungsstufen als in [9] wird dieselbe Annahme getroffen. Erste numerische Simulationen unter Einbeziehung der *LSUB1*-Korrelationskoeffizienten

zeigten, dass die Iterationsverfahren zum Auffinden der Lösungen für einige Parameterwerte sehr schlecht, gegen unphysikalische Werte oder gar nicht konvergierten. In den Simulationen, die zu den hier präsentierten Ergebnissen führten, wurden die *LSUB1*-Koeffizienten stets vor der Aufstellung der Gleichungssysteme explizit Null gesetzt. Um den Magnetisierungsprozess in diesem System zu untersuchen, wurde die totale Gittermagnetisierung M entlang der Richtung des äußeren Feldes bestimmt. Diese Größe ist gegeben durch:

$$M = \frac{1}{N_S} \left\langle \sum_i s_i^z \right\rangle = \frac{1}{N_S} \langle \tilde{\Psi} | \sum_i s_i^z | \Psi \rangle. \quad (5.3)$$

Hierbei ist $s = \frac{1}{2}$ der Quantenspin. Nach der Koordinatentransformation entsprechend Abschnitt 2.3.1 wird (5.3) zu:

$$M = -\frac{\sin(\theta)}{N_S} \sum_i \langle \tilde{\Psi} | s_i^z | \Psi \rangle - \frac{\cos(\theta)}{2N_S} \sum_{i_A} \langle \tilde{\Psi} | s_{i_A}^+ + s_{i_A}^- | \Psi \rangle + \frac{\cos(\theta)}{2N_S} \sum_{i_B} \langle \tilde{\Psi} | s_{i_B}^+ + s_{i_B}^- | \Psi \rangle. \quad (5.4)$$

In (5.4) kennzeichnen die Indizes i_A und i_B eine Summation über alle Gitterplätze des *A*- bzw. *B*-Untergitters. Der Index i kennzeichnet eine Summation über alle Gitterplätze.

Im Folgenden sollen die Ergebnisse zum untersuchten Quadratgitter im Magnetfeld präsentiert werden. Die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit des Magnetfeldes λ ist in Bild 5.3 dargestellt. Man erkennt eine sehr schnelle Konvergenz mit wachsender

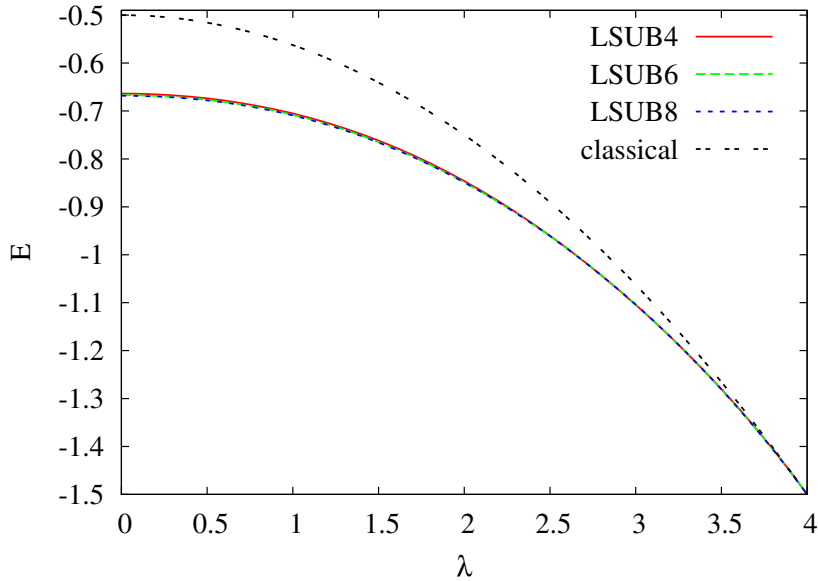


Abbildung 5.3: Darstellung der Grundzustandsenergie pro Spin E für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter im Magnetfeld der Stärke λ . Man beachte, dass die *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*-Kurven nahezu übereinander liegen.

Näherungsstufe *LSUBn*. Wie in früheren Untersuchungen mittels der CCM [27], ist für ein verschwindendes Magnetfeld ($\lambda = 0$) die Grundzustandsenergie sehr gut approximiert. Eine Diskussion dieser Ergebnisse kann man auch in [27] finden. Das exakte

Ergebnis bei der Sättigungsfeldstärke $M = M_s$ ($\lambda_s = 4$, die Spins zeigen hier alle in Feldrichtung) wird ebenfalls reproduziert. Die Ergebnisse für die Gittermagnetisierung sind in Abbildung 5.4 zu sehen. Man erkennt zunächst ein unterschiedliches Verhal-

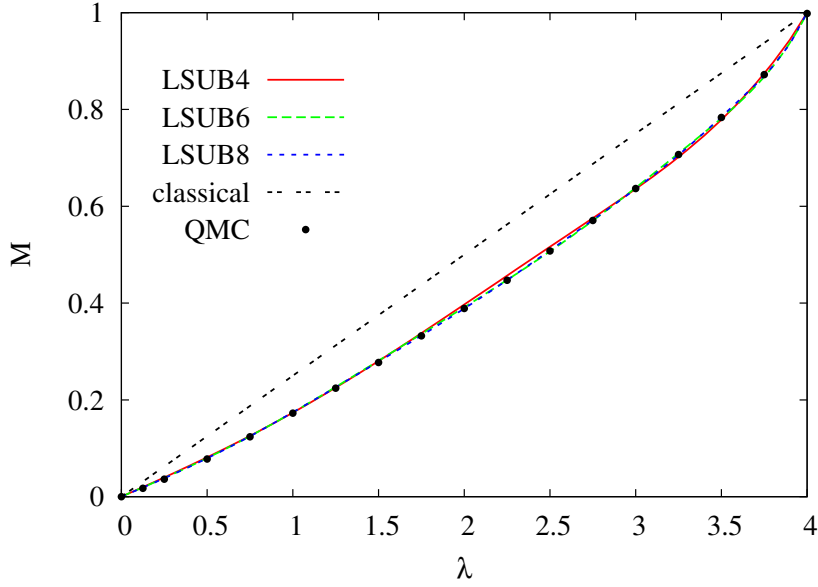


Abbildung 5.4: Darstellung der Gittermagnetisierung für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter im Magnetfeld der Stärke λ im Vergleich zu den Ergebnissen der QMC aus [73]. Man beachte, dass die *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*-Kurven nahezu übereinander liegen.

ten der Magnetisierung des Quantenspinsystems im Vergleich zum linearen Verhalten $M_{cl} = \frac{1}{4}\lambda$ der Magnetisierung des klassischen Modells, welche durch Quanteneffekte hervorgerufen werden. Des Weiteren erkennt man in Bild 5.4, dass die Magnetisierung des Quantenmodells im Bereich $0 < \lambda < \lambda_s$ kleiner als die des klassischen Modells ist. Bemerkenswert ist hier auch, dass die Abweichungen zwischen den *LSUBn*-Ergebnissen schnell abnehmen. Die Differenz zwischen den *LSUB6* und *LSUB8*-Werten ist bereits kleiner als $2 \cdot 10^{-3}$ für alle Werte λ des angelegten Magnetfeldes. Die Ergebnisse der CCM stimmen hierbei sehr gut mit den Ergebnissen der QMC-Untersuchungen [73] überein, welche als die präzisesten verfügbaren Ergebnisse angesehen werden können. Eine Darstellung des Spinwinkels θ für das Quantenspinsystem im Vergleich zum klassischen Spinwinkel ist in Abbildung 5.5 gegeben. Erneut findet man nennenswerte Unterschiede zwischen dem klassischen Verhalten und dem Verhalten des Quantensystems. Die Abweichungen nehmen bis etwa zum Wert $\lambda \approx 0.35$ des Magnetfeldes zu. Oberhalb von $\lambda \approx 0.35$ nähert sich der Spinwinkel schnell seinem Sättigungswert $\theta = \frac{\pi}{2}$. Die gewonnenen Resultate für die Grundzustandsenergie pro Spin E und für die Gittermagnetisierung M in Abhängigkeit vom Magnetfeld können nun benutzt werden, um die magnetische Suszeptibilität zu berechnen:

$$\chi = \frac{1}{2} \frac{dM}{d\lambda} = -\frac{d^2 E}{d\lambda^2}. \quad (5.5)$$

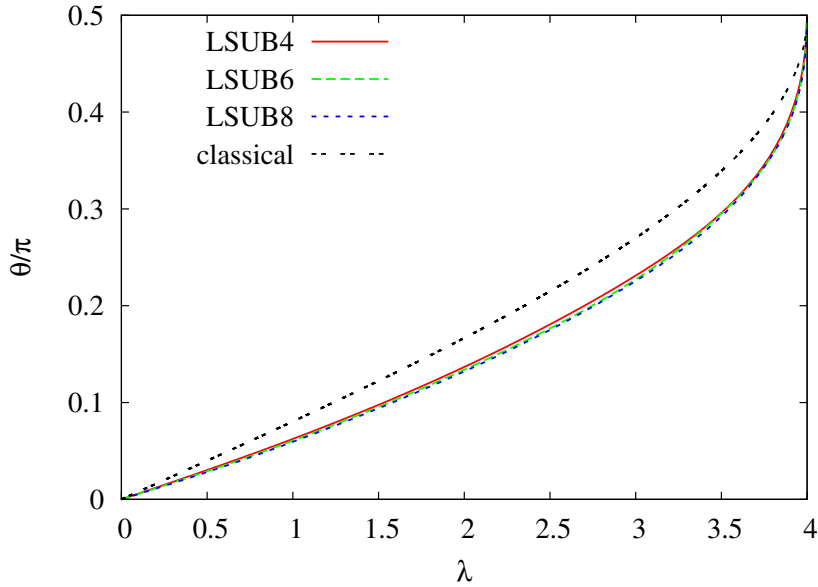


Abbildung 5.5: Darstellung des Spinwinkels $\frac{\theta}{\pi}$ für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter im Magnetfeld der Stärke λ . Man beachte, dass die *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*-Kurven nahezu übereinander liegen.

Der Faktor $\frac{1}{2}$ berücksichtigt die Definition von M auf dem Intervall $[0, 1]$. Die Suszeptibilität χ wird hier als Größe bezogen auf einen Gitterplatz betrachtet¹. Für die hier durchgeführten Berechnungen der Suszeptibilität wurde die zweite Ableitung der Grundzustandsenergie benutzt, da ihre numerische Genauigkeit mit dem vorliegenden Programmpaket größer ist. Um die Genauigkeit zu testen, wurden entsprechend (5.5) für kleine Felder die Suszeptibilität χ nach $\chi = \frac{1}{2} \frac{dM}{d\lambda}$ und nach $\chi = -\frac{d^2 E}{d\lambda^2}$ bestimmt. Die so gewonnenen Ergebnisse stimmen immerhin noch für mindestens sechs Dezimalstellen überein.

Generell ist zu bemerken, dass die Suszeptibilität χ für $\lambda \rightarrow 0$, die Grundzustandsenergie E , die Gittermagnetisierung M , die Spin-Stiffness und die Spinwellen-Geschwindigkeit im Wesentlichen das Grundzustandsverhalten des betrachteten Quantenspinsystems im Magnetfeld charakterisieren. Wurden die Grundzustandsenergie, die Gittermagnetisierung sowie die Spin-Stiffness bereits im Rahmen früherer CCM-Untersuchungen bestimmt [27], so sind die Suszeptibilitäten χ für $\lambda \rightarrow 0$ erstmals im Rahmen dieser Arbeit berechnet worden. Die *LSUB2*, *LSUB4*, *LSUB6*, *LSUB8* und *LSUB10* Ergebnisse sind hierbei $\chi = 0.08596$, $\chi = 0.07915$, $\chi = 0.07650$, $\chi = 0.07498$ und $\chi = 0.07388$. Diese Ergebnisse wurden extrapoliert, um einen Wert für den Limes $n \rightarrow \infty$ zu bestimmen. Erfahrungen, wie die Spin-Stiffness und Suszeptibilitäten nachvollziehbar extrapoliert werden können, wurden ebenfalls in früheren Untersuchungen [35, 130] gesammelt. Es zeigte sich, dass gute Extrapolationsergebnisse mit der Extrapolation (2.60) erzielt werden können. Die Verwendung dieser Extrapolation ergibt den Wert $\chi = 0.0700(6)$. Der Wert in den Klammern kennzeichnet die Standardabweichung. Dieses Resultat stimmt ebenfalls sehr gut mit den Ergebnissen anderer Methoden wie QMC ($\chi = 0.0669(7)$) [122], Reihenentwicklung ($\chi = 0.0659(10)$) [123], linearer SWT

¹ χ wird manchmal bezogen auf das Volumen definiert, z.B. in [128]. Für das Quadratgitter führt dies nicht zu anderen Werten für χ ; beim Dreiecksgitter kommt jedoch ein Faktor $2/\sqrt{3}$ hinzu.

($\chi = 0.05611$) [121], SWT in 2. Ordnung ($\chi = 0.06426$) [125] und SWT in 3. Ordnung ($\chi = 0.06291$) [124] überein. Eine Darstellung der *LSUBn*-Datenpunkte und der Extrapolation findet man in Abbildung 5.6. Die Abhängigkeit der Suszeptibilität χ

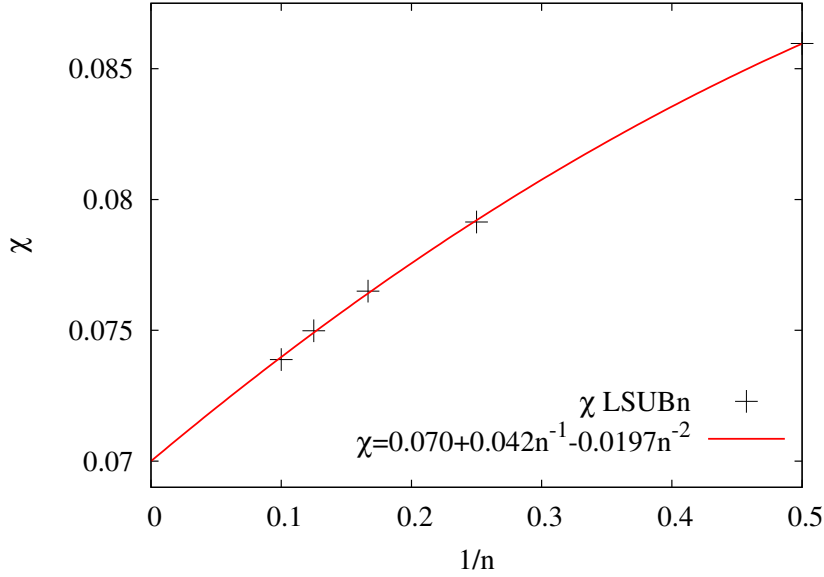


Abbildung 5.6: Darstellung der *LSUBn*-Ergebnisse ($n = 2, 4, 6, 8, 10$) der Suszeptibilität χ ($\lambda \rightarrow 0$) für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter im Magnetfeld, zusammen mit der Extrapolationskurve nach (2.60).

vom Magnetfeld λ ist ebenfalls interessant (siehe hierzu auch [115, 131, 132, 133]). Es wurden hierzu die Feldabhängigkeit von χ in *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8* bestimmt und in Abbildung 5.7 dargestellt. Der ebenfalls in Abbildung 5.7 dargestellte Quotient $\frac{M}{2\lambda}$ wird oft in experimentellen Untersuchungen bestimmt. Zu Vergleichszwecken wurde ebenfalls der feldunabhängige klassische Wert der Suszeptibilität $\chi_{cl} = \frac{1}{8}$ eingetragen. Man erkennt, dass χ und $\frac{M}{2\lambda}$ bis zum Wert $\lambda = 0.4 = \frac{\lambda_s}{10}$ nahezu übereinstimmen. Für stärkere Felder weichen diese Größen jedoch signifikant voneinander ab. Für experimentelle Untersuchungen ist der Quotient $\frac{M}{2\lambda}$ demnach eine gute Approximation für χ , wenn die Materialien (in Anbetracht der experimentell relevanten Magnetfelder) eine hohe Sättigungsfeldstärke λ_s aufweisen, nicht jedoch bei kleinen Sättigungsfeldstärken. Des Weiteren wurde ein Anwachsen der Suszeptibilität χ mit dem Magnetfeld λ auch experimentell beim quasi-zweidimensionalen Antiferromagneten $\text{Ba}_2\text{CuGe}_2\text{O}_7$ [131] beobachtet. Die hier gewonnenen Resultate stimmen ebenfalls sehr gut mit den Ergebnissen anderer Methoden wie QMC, SWT und ED [126, 127] überein. Hier wie auch dort ist χ für mittlere Feldstärken $1.5 \lesssim \lambda \lesssim 3.5$ nahezu konstant und in der Nähe des klassischen Wertes, um dann mit weiterer Zunahme des Feldes rasch anzusteigen. Die leichten Oszillationen der Suszeptibilität im Bereich $1.5 \lesssim \lambda \lesssim 3.5$ sind vermutlich Artefakte der CCM-Näherung. Die Anzahl der Oszillationen nimmt mit wachsendem n in *LSUBn* zu, die Amplitude jedoch ab. Man kann vermuten, dass für $n \rightarrow \infty$ die Oszillationen vollständig verschwinden.

Zusammenfassend lässt sich für den hier untersuchten Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem Quadratgitter in einem äußeren Magnetfeld feststellen, dass sich dieses Quantensystem im Wesentlichen wie das entsprechende klassische Modell verhält

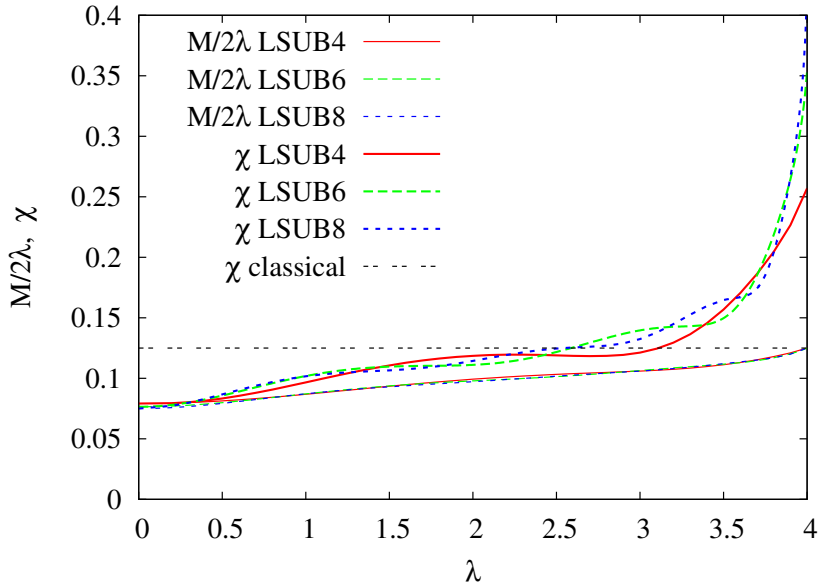


Abbildung 5.7: Darstellung der Suszeptibilität χ und des Quotienten $\frac{M}{2\lambda}$ in Abhängigkeit des Magnetfeldes λ für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter im Magnetfeld. Man beachte, dass die *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*-Kurven für $\frac{M}{2\lambda}$ nahezu übereinstimmen.

und Quantenfluktuationen das Verhalten nur geringfügig modifizieren. Die Abweichung zum klassischen Verhalten nimmt hierbei mit wachsender Feldstärke $\lambda \rightarrow \lambda_s$ zu (siehe Abbildung 5.7).

5.2 Frustriertes Dreiecksgitter im Magnetfeld

Wie zuvor beim Quadratgitter im Magnetfeld stellt sich auch hier die Frage nach geeigneten Modellzuständen. In der Einleitung zu diesem Kapitel wurde bereits angegeben, dass im klassischen Modell die benachbarten Spins im Grundzustand einen Winkel von 120° zueinander einnehmen. Auch im klassischen Modell ändern bei Anlegen eines Magnetfeldes die Spins ihre Richtung und passen sich der Feldrichtung an. Im Gegensatz zum bipartiten Quadratgitter ist es beim Dreiecksgitter zweckmäßig zu unterscheiden, ob das Feld in der Ebene der Spins (planar) oder senkrecht dazu angelegt wird. Im klassischen Modell sind beide Situationen energetisch äquivalent [108, 117, 118, 119], thermische Fluktuationen oder Quantenfluktuationen bevorzugen jedoch die planare Situation [108, 117, 118, 119]. Für diese Arbeit wird das Magnetfeld demzufolge in der Spinebene, d.h. planar, angelegt.

Analog zu den Betrachtungen in [108, 112] werden für das Dreiecksgitter im Magnetfeld drei Modellzustände verwendet, welche zusammen mit dem Modellzustand für das Quadratgitter in Bild 5.1 illustriert sind. Der erste dieser Modellzustände (Modellzustand I) ist dadurch gekennzeichnet, dass die Spins der *A*- und *B*-Untergitter in etwa in Feldrichtung weisen und mit der *x*-Achse den Winkel α bzw. den Winkel $\pi - \alpha$ einschließen. Der verbleibende Spin auf dem *C*-Untergitter zeigt dabei generell entgegen der Feldrichtung. Im Modellzustand II zeigen die Spins der *A*- und *B*-Untergitter exakt in und die Spins des *C*-Untergitters erneut genau entgegen der Feldrichtung. Im dritten

Modellzustand (Modellzustand III) schließen die Spins der A - und B -Untergitter mit der x -Achse den Winkel α ein und die Spins des C -Untergitters den Winkel β . Wie in Bild 5.1 zu sehen, ist der Modellzustand II ein Grenzfall der beiden anderen. Konkrete CCM-Simulationen wurden auf der Grundlage der Modellzustände I und III durchgeführt. Die Koordinatentransformation nach (2.22) führt mit (5.1) für den Modellzustand I auf folgenden Hamilton-Operator:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\langle i_A \rightarrow i_B \rangle} \left\{ -\frac{1}{4}(1 + \cos(2\alpha))(s_{i_A}^+ s_{i_B}^+ + s_{i_A}^- s_{i_B}^-) \right. \\
& + \frac{1}{4}(1 - \cos(2\alpha))(s_{i_A}^+ s_{i_B}^- + s_{i_A}^- s_{i_B}^+) \\
& - \cos(2\alpha)s_{i_A}^z s_{i_B}^z + \frac{1}{2}\sin(2\alpha)(s_{i_A}^z s_{i_B}^+ + s_{i_A}^z s_{i_B}^-) \\
& \left. - \frac{1}{2}\sin(2\alpha)(s_{i_A}^+ s_{i_B}^z + s_{i_A}^- s_{i_B}^z) \right\} \\
+ & \sum_{\langle i_{B,C} \rightarrow i_{C,A} \rangle} \left\{ -\frac{1}{4}(1 + \sin(\alpha))(s_{i_{B,C}}^+ s_{i_{C,A}}^+ + s_{i_{B,C}}^- s_{i_{C,A}}^-) \right. \\
& + \frac{1}{4}(1 - \sin(\alpha))(s_{i_{B,C}}^+ s_{i_{C,A}}^- + s_{i_{B,C}}^- s_{i_{C,A}}^+) \\
& - \sin(\alpha)s_{i_{B,C}}^z s_{i_{C,A}}^z + \frac{1}{2}\cos(\alpha)(s_{i_{B,C}}^z s_{i_{C,A}}^+ + s_{i_{B,C}}^z s_{i_{C,A}}^-) \\
& \left. - \frac{1}{2}\cos(\alpha)(s_{i_{B,C}}^+ s_{i_{C,A}}^z + s_{i_{B,C}}^- s_{i_{C,A}}^z) \right\} \\
- & \lambda \sum_{i_C} s_{i_C}^z + \lambda \sin(\alpha) \left(\sum_{i_A} s_{i_A}^z + \sum_{i_B} s_{i_B}^z \right) \\
- & \frac{\lambda}{2} \cos(\alpha) \sum_{i_A} (s_{i_A}^+ + s_{i_A}^-) + \frac{\lambda}{2} \cos(\alpha) \sum_{i_B} (s_{i_B}^+ + s_{i_B}^-). \tag{5.6}
\end{aligned}$$

Die Koordinatentransformation für den Modellzustand III ist wegen des Auftretens zweier Winkel (α und β) etwas aufwändiger und führt mit (5.1) auf den Hamilton-

Operator:

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{\langle i_C \rightarrow i_{A,B} \rangle} \left\{ \frac{1}{4}(-1 + \cos(\alpha - \beta))(s_{i_C}^+ s_{i_{A,B}}^+ + s_{i_C}^- s_{i_{A,B}}^-) \right. \\
& + \frac{1}{4}(1 + \cos(\alpha - \beta))(s_{i_C}^+ s_{i_{A,B}}^- + s_{i_C}^- s_{i_{A,B}}^+) \\
& + \cos(\alpha - \beta) s_{i_C}^z s_{i_{A,B}}^z \\
& + \frac{1}{2} \sin(\alpha - \beta)(s_{i_C}^+ s_{i_{A,B}}^z + s_{i_C}^- s_{i_{A,B}}^z) \\
& \left. - \frac{1}{2} \sin(\alpha - \beta)(s_{i_C}^z s_{i_{A,B}}^+ + s_{i_C}^z s_{i_{A,B}}^-) \right\} \\
& + \sum_{\langle i_A, i_B \rangle} \left\{ \frac{1}{2}(s_{i_A}^+ s_{i_B}^- + s_{i_A}^- s_{i_B}^+) + s_{i_A}^z s_{i_B}^z \right\} \\
& + \lambda \sin(\alpha) \left(\sum_{i_A} s_{i_A}^z + \sum_{i_B} s_{i_B}^z \right) + \lambda \sin(\beta) \sum_{i_C} s_{i_C}^z \\
& + \frac{\lambda}{2} \cos(\alpha) \left\{ \sum_{i_A} (s_{i_A}^+ + s_{i_A}^-) + \sum_{i_B} (s_{i_B}^+ + s_{i_B}^-) \right\} \\
& + \frac{\lambda}{2} \cos(\beta) \sum_{i_C} (s_{i_C}^+ + s_{i_C}^-). \tag{5.7}
\end{aligned}$$

Wie in den vorherigen Untersuchungen zum Quadratgitter im Magnetfeld begründet, werden auch für die hier durchzuführenden CCM-Simulationen die Korrelationskoeffizienten der *LSUB1*-Terme Null gesetzt. Analog zu (5.4) findet man für die Gittermagnetisierung des Dreiecksgitters:

$$M = \frac{M_A + M_B + M_C}{3}; \quad M_{A,B,C} = \frac{1}{N_{A,B,C}} \sum_{i_{A,B,C}} \langle \tilde{\Psi} | s_{i_{A,B,C}}^z | \Psi \rangle. \tag{5.8}$$

In (5.8) gilt natürlich $N = N_A + N_B + N_C$ und der Index i_A kennzeichnet eine Summation über alle N_A -Gitterplätze des *A*-Untergitters (i_B und i_C selbiges für die entsprechenden verbleibenden Untergitter *B* und *C*). Angemerkt werden soll, dass die Untergittermagnetisierungen in Anwesenheit eines Magnetfeldes durchaus voneinander abweichen können. Die CCM-Rechnungen zu hohen Näherungsstufen sind für dieses Gitter besonders unter Verwendung des Modellzustandes III sehr anspruchsvoll, da das Energieminimum in Abhängigkeit zweier Winkel α und β bestimmt werden muss. Als numerisch am stabilsten erwies sich dabei die Vorgehensweise, zuerst einen Winkel (z.B. β) zu fixieren und das Energieminimum in Abhängigkeit des anderen Winkels (α) zu suchen. Deshalb soll dieses Verfahren zunächst kurz beschrieben werden. Der Winkel α wird hierbei mit einer kleinen Abweichung $\Delta\alpha$ modifiziert und die Energie erneut berechnet. Nimmt die Energie zu, wird das Vorzeichen von $\Delta\alpha$ und der Betrag geändert (Intervallschachtelung). Dann wird der zweite Winkel um einen kleinen Betrag $\Delta\beta$ variiert und das Energieminimum in Abhängigkeit von α erneut gesucht. Die gefundenen minimalen Energien werden verglichen. Je nach Relation dieser Energien, werden dann das Vorzeichen und der Betrag der Grösse $\Delta\beta$ festgelegt und das Verfahren bis zur Konvergenz ($\Delta E \lesssim 10^{-12}$) wiederholt. Diese Vorgehensweise ist wegen der hohen Zahl an notwendigen Iterationsschritten numerisch keineswegs optimal,

fürte jedoch im Vergleich zu anderen Vorgehensweisen zur Konvergenz gegen physikalisch sinnvolle Werte. Alternative Verfahrensweisen wurden ebenfalls entworfen und auch getestet². Sie erwiesen sich als erheblich besser, was die Effizienz betrifft und konvergierten gegen dieselben Werte, wie die zuvor beschriebene Vorgehensweise. Jedoch zeigten sich Konvergenzprobleme für einige (allerdings unkritische) Werte des Feldes λ . Für die Bestimmung der im Folgenden präsentierten Ergebnisse wurde deshalb die dargestellte (aus der Sicht eines Programmierers allerdings ineffektive) Methode verwendet. An optimierten Verfahren wird derzeit noch gearbeitet. In Bild 5.8 ist eine Darstellung der Energielandschaft für $\lambda = 4$ gegeben. Für dieses Bild wurde der Win-

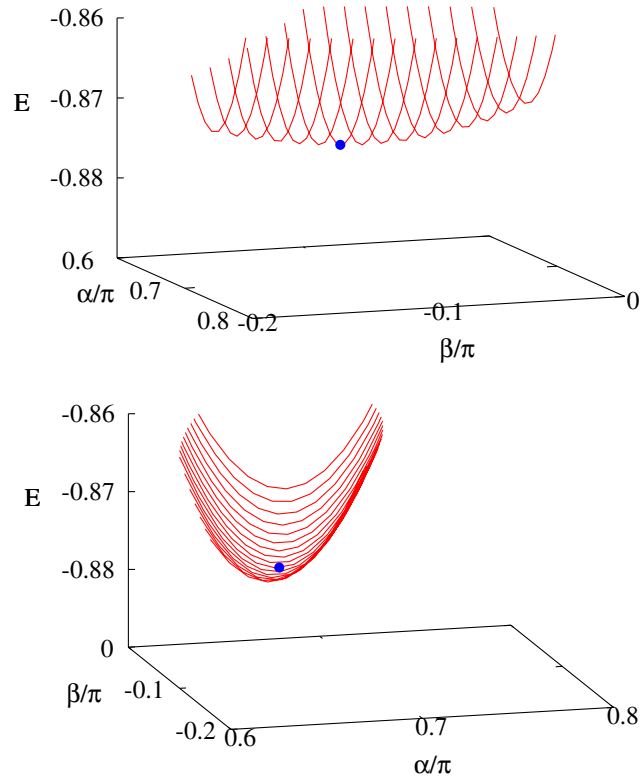


Abbildung 5.8: Darstellung der Energielandschaft für $\lambda = 4$ unter Verwendung des Modellzustandes III für das Dreiecksgitter im Magnetfeld. Die Energie ist hier als Funktion von α dargestellt, der Winkel β ist in regelmäßigen Abständen fixiert. Das Landschaftsbild wird aus zwei Perspektiven dargestellt, wobei die obere Abbildung etwa den Blick auf die Energie-Beta-Ebene zeigt und die untere Abbildung etwa den Blick auf die Energie-Alpha-Ebene. In beiden Perspektiven erkennt man ein deutliches Energieminimum. Der genaue Wert des Energieminimums in Abhängigkeit der Winkel α und β ist durch einen Punkt in beiden Figuren gekennzeichnet.

kel β (in der Nähe des Minimums) für verschiedene Werte fixiert und die Energie als Funktion von α dargestellt. Das Minimum der Energie in Abhängigkeit beider Winkel ist

²Insbesondere wurden beide Winkel simultan durch Wandern um einen kleinen Betrag entlang von Kompassrichtungen auf der α - β -Ebene variiert. Es wurden, ausgehend von einem Punkt, in acht Richtungen Vergleichswerte berechnet und der Pfad verfolgt, welcher die kleinste Energie lieferte.

deutlich zu erkennen. Starten die Iterationsverfahren nicht zu weit vom tatsächlichen Minimum entfernt, so sind sie hier auch stabil. Um dies sicherzustellen, werden die jeweiligen Vorgängerwerte der Korrelationskoeffizienten $\{a_L, \tilde{a}_L\}$ für einen Wert des Feldes λ als Startwerte des nachfolgenden Datenpunktes verwendet. Für die Bestimmung der *LSUB8*-Datenpunkte wurde ein Beowulf-Cluster-Computer der Universität Magdeburg [134] unter Benutzung von 110 Kernen (Intel XEON 3GHz CPU) verwendet. Der Hauptspeicherbedarf lag bei etwa $35GB$ und die Rechenzeit bei durchschnittlich zwei Tagen pro Datenpunkt.

Die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie des Dreiecksgitters im Magnetfeld sind in Abbildung 5.9 dargestellt. Hierbei wurden die niedrigsten Energien der betrachteten

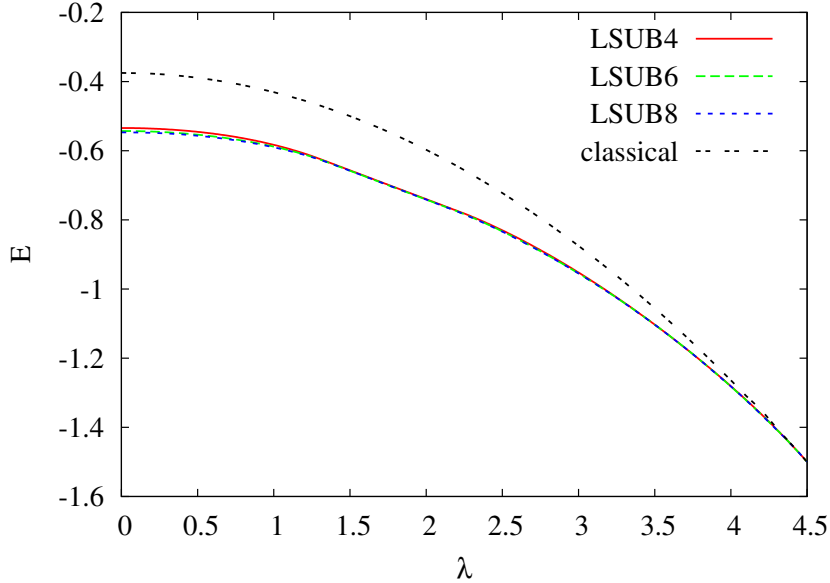


Abbildung 5.9: Darstellung der Grundzustandsenergie E für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ . Die *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*-Kurven liegen dicht beieinander.

Modellzustände eingetragen. Bis zum Plateau sind dies die Ergebnisse bestimmt mit Modellzustand I. Nach dem Plateau sind dies die Ergebnisse bestimmt mit Modellzustand III. Innerhalb des Plateaus liefern beide Modellzustände dieselbe Grundzustandsenergie. Die Genauigkeit der CCM-Ergebnisse ist hierbei schon für kleine *LSUBn* für den gesamten Feldbereich λ recht hoch, was man den nah beieinanderliegenden Energiekurven für die einzelnen Näherungsstufen entnehmen kann. Im Unterschied zum klassischen Modell, erkennt man eine starke Absenkung der Grundzustandsenergie für kleine Felder λ . Im Limit $\lambda \rightarrow \lambda_s$ stimmen die klassische Grundzustandsenergie und die des Quantensystems überein.

Abbildung 5.10 gibt eine Darstellung der Gittermagnetisierung M in Abhängigkeit vom Magnetfeld λ . Auch hier konvergieren die *LSUBn*-Daten rasch mit wachsendem n . Das Quantensystem zeigt jedoch ein grundsätzlich anderes Verhalten als das entsprechende klassische System. Im klassischen Fall ist der Verlauf von M mit dem Feld λ linear ($M_{cl} = \frac{2}{9}\lambda$). Das Quantensystem weicht von diesem Verhalten ab und zeigt insbesondere einen konstanten Bereich bei $\frac{M}{M_s} = \frac{1}{3}$ (Plateau). Anzumerken ist, dass der Bereich des Plateaus zum linearen Bereich der $E(\lambda)$ -Kurve in Abbildung 5.9 korrespondiert. Die-

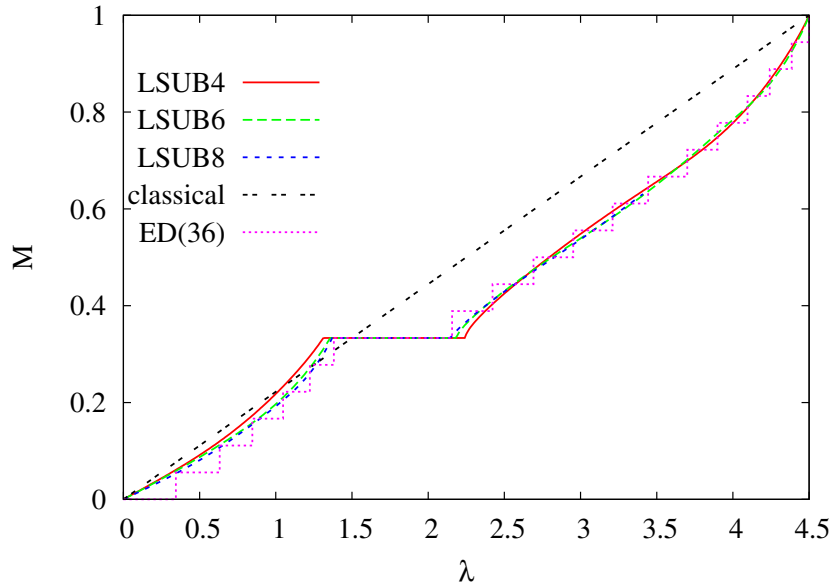


Abbildung 5.10: Darstellung der Gittermagnetisierung M für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ . Zum Vergleich wurden die ED-Ergebnisse aus [1] mit eingetragen. Zur Bestimmung der Kurvenbereiche vor dem Plateau wurde Modellzustand I verwendet, für die Kurvenbereiche nach dem Plateau Modellzustand III und innerhalb des Plateaus stimmen die Ergebnisse beider Modellzustände I und III überein.

ses Plateau ist ein bekanntes Verhalten dieses Quantensystems und wurde bereits mit anderen Näherungsverfahren untersucht [1, 103, 106, 107, 108, 112]. Im Grundzustand des Quantensystems besitzen die Spins für den Bereich des Plateaus eine Spinorientierung, die der des Modellzustandes II (siehe Bild 5.1) entspricht. Dieses Verhalten, auch als *order-from-disorder*-Phänomen [95, 96, 98] bezeichnet, wird durch Quantenfluktuationen verursacht, die kollineare Spinorientierungen bevorzugen. Im klassischen System wird diese Spinorientierung nur für $\lambda = 1.5$ angenommen, wo die verwendeten Modellzustände im klassischen System äquivalent sind. Die Zahlenwerte λ_1 und λ_2 , die den Beginn und das Ende des Plateaus kennzeichnen, sind in Tabelle 5.1 eingetragen. Im Rahmen der CCM-Untersuchungen werden die *LSUB8*-Ergebnisse $\lambda_1 \approx 1.37$ und $\lambda_2 \approx 2.15$ als die genauesten Resultate für die Plateaugrenzen angesehen. Die hier be-

Tabelle 5.1: CCM-Ergebnisse λ_1 und λ_2 für den Beginn und das Ende des Plateaus für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld.

Näherungsstufe/Methode	λ_1	λ_2
LSUB4	1.312	2.241
LSUB5	1.370	2.030
LSUB6	1.357	2.185
LSUB7	1.375	2.105
LSUB8	1.370	2.145
SWT [108]	1.248	2.145
ED [1]	1.38	2.16

stimmte Weite des Plateaus stimmt mit den Ergebnissen der SWT [108] in etwa und mit den Ergebnissen der ED [1] gut überein.

Die SWT-Untersuchungen wurden nur bis zur ersten Ordnung in $\frac{1}{s}$ durchgeführt. Vermutlich würde die Verwendung höherer Ordnungen in der SWT Resultate liefern, welche besser mit der CCM und mit der ED übereinstimmen.

Die Untergittermagnetisierungen M_A , M_B und M_C der individuellen Untergitter (nach (5.8)) in Abhängigkeit des Feldes λ sind in den Abbildungen 5.11 und 5.12 dargestellt. In der Literatur wurde keine explizite Darstellung dieser Größen gefunden. Insgesamt ist das Verhalten der Untergittermagnetisierungen, deutlich vom klassischen Verhalten zu unterscheiden. M_C scheint interessanterweise vor Erreichen des Plateaus bei $\lambda = \lambda_1$ abzunehmen. In diesem Bereich nehmen die Untergittermagnetisierungen $M_A = M_B$ monoton zu. Dieses Verhalten ändert sich im Bereich $\lambda_2 < \lambda \lesssim 2.8$ oberhalb des Plateaus, wo M_A und M_B abnehmen und M_C (bis zur Sättigungsmagnetisierung λ_s) zunimmt.

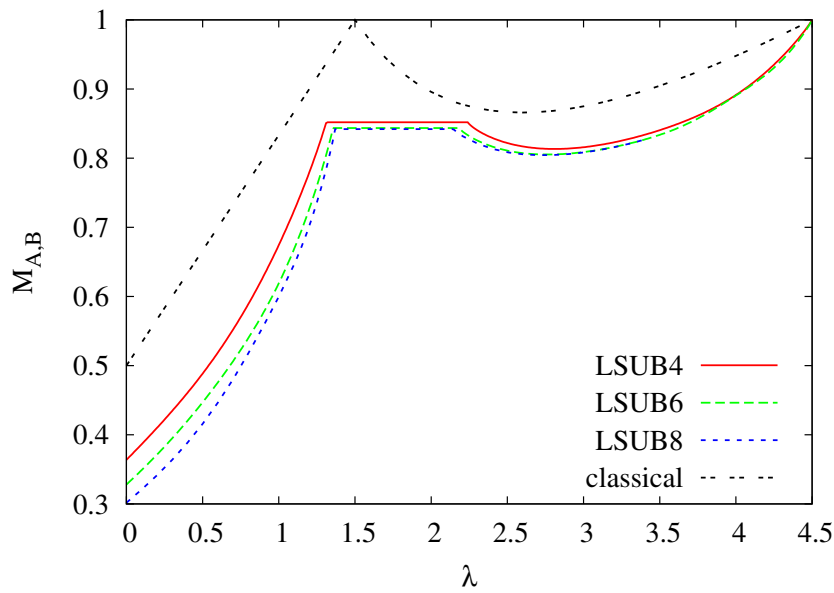


Abbildung 5.11: Darstellung der Untergittermagnetisierung M_A und M_B der A - und B -Untergitter für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ . Für alle Feldstärken λ gilt $M_A = M_B$.

In den Abbildungen 5.13 und 5.14 ist das Verhalten der Quantenwinkel α und β graphisch dargestellt. Auch diese Kurven wurden erstmalig im Rahmen dieser Arbeit ermittelt. Man erkennt ebenfalls signifikante Unterschiede zum Verhalten des entsprechenden klassischen Systems. Im Gegensatz zum klassischen Spinsystem sind die Winkel α und β im Quantensystem für den Bereich des Plateaus konstant. Abgesehen von dieser Region ändern sich die Winkel α und β kontinuierlich mit dem Feld, wenn auch nicht gleichförmig. Sprunghafte Änderungen der Winkel, wie beim Übergang von der antiferromagnetischen kollinearen Phase zur nichtkollinearen Spiralphase des frustrierten Quantenspinsystems aus Kapitel 4, sind hier nicht zu finden. Der Winkel α ändert sich mit dem Feld λ oberhalb des Plateaus nicht monoton (siehe Abbildung 5.13). Der Winkel α nimmt zunächst bis zu einem Maximum bei $\lambda \approx 3.2$ zu, um dann rasch zum Grenzwert $\alpha = \frac{\pi}{2}$ bei Sättigungsfeldstärke λ_s abzunehmen.

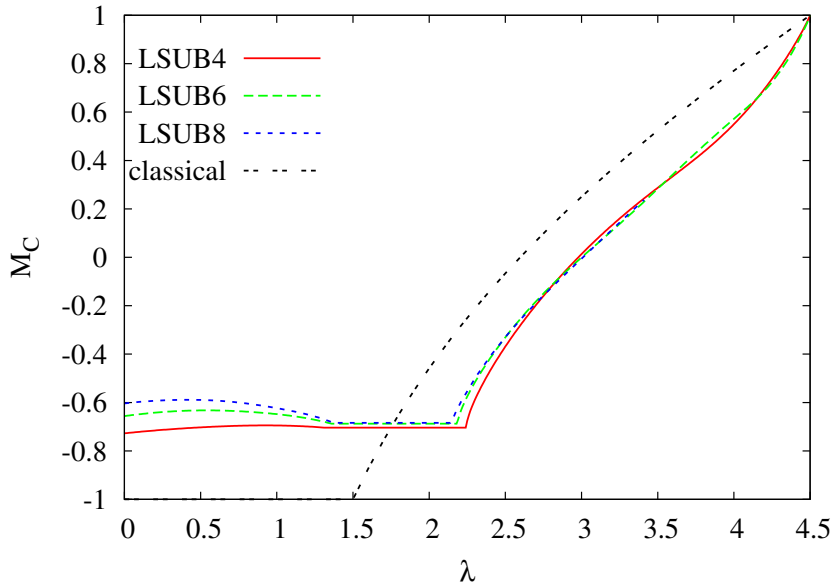


Abbildung 5.12: Darstellung der Untergittermagnetisierung M_C des C -Untergitters für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ .

Bisher wurde das Verhalten dieser Winkel (und auch der Untergittermagnetisierungen) experimentell nicht untersucht. Solche experimentellen Untersuchungen wären jedoch auch zu Vergleichszwecken zwischen Theorie und Experiment interessant.

Für die Suszeptibilität bei verschwindendem Feld $\chi(\lambda \rightarrow 0)$ (vgl. 5.5) wurden in den Näherungsstufen $LSUB2$, $LSUB4$, $LSUB6$ und $LSUB8$ die Werte $\chi = 0.1139$, $\chi = 0.08568$, $\chi = 0.08200$ und $\chi = 0.7378$ bestimmt. Zusätzlich wurden die individuellen Reaktionen der Spins auf den Untergittern, d.h. $\chi_{A,B,C} = \frac{1}{6} \frac{dM_{A,B,C}}{d\lambda}$ ermittelt. Wegen $M = \frac{M_A + M_B + M_C}{3}$ folgt hierbei $\chi = \chi_A + \chi_B + \chi_C$. Die gewonnenen Ergebnisse der Suszeptibilität wurden ebenfalls nach (2.60) extrapoliert und in Abbildung 5.15 dargestellt. Als Resultat der Extrapolation erhält man $\chi = 0.065(23)^3$. Die Extrapolation führt zu akzeptablen Werten der Suszeptibilität χ im Limes $n \rightarrow \infty$, wenn auch weniger präzise als für das Quadratgitter im Magnetfeld, was mit einer leichten, aber erkennbaren Streuung der $LSUBn$ -Werte von χ um die Extrapolationskurve (siehe Abbildung 5.15) zusammenhängt. Diesem Bild kann man auch entnehmen, dass der Hauptbeitrag zur Suszeptibilität χ von den Spins auf den Untergittern A und B herrührt. Dies ist nicht sehr überraschend, weil die Spins auf dem C -Untergitter antiparallel zum Feld fixiert sind (man betrachte hierzu die Spinorientierung im Modellzustand I des Dreiecksgitters in Abbildung 5.1), während sich die Spins auf den A - und B -Untergittern in Feldrichtung verdrehen können. Extrapoliert man die Suszeptibilitäten $\chi_{A,B,C}$ der Untergitter selbst nach (2.60), so findet man für $\chi_{A,B} = 0.0245(54)$ und für $\chi_C = 0.016(13)$. Die Summe führt auf den oben angegebenen Wert $\chi = 0.065$. Im Rahmen der SWT wurde die Suszeptibilität bestimmt zu $\chi = 0.0794$ [108, 128]. Man beachte, dass in [128] die Suszeptibilität, die mit der hier bestimmten verglichen werden kann, als χ_{\perp} bezeichnet und als Suszeptibilität pro Volumen definiert wurde. Die Ergebnisse für χ bestimmt mit der CCM und der SWT sind demnach vergleichbar, wenn auch mit

³Die Werte in den Klammern kennzeichnen die Standardabweichungen.

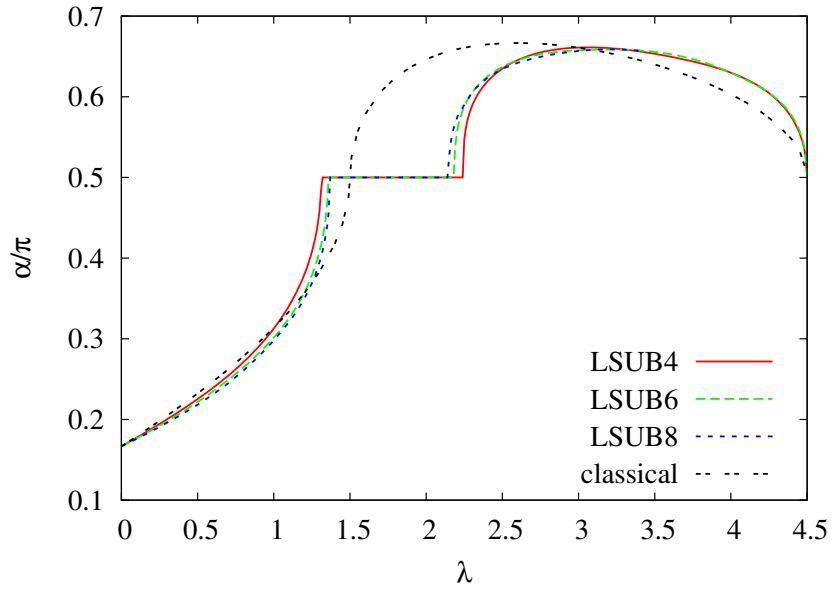


Abbildung 5.13: Darstellung des Quantenwinkels $\frac{\alpha}{\pi}$ für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ .

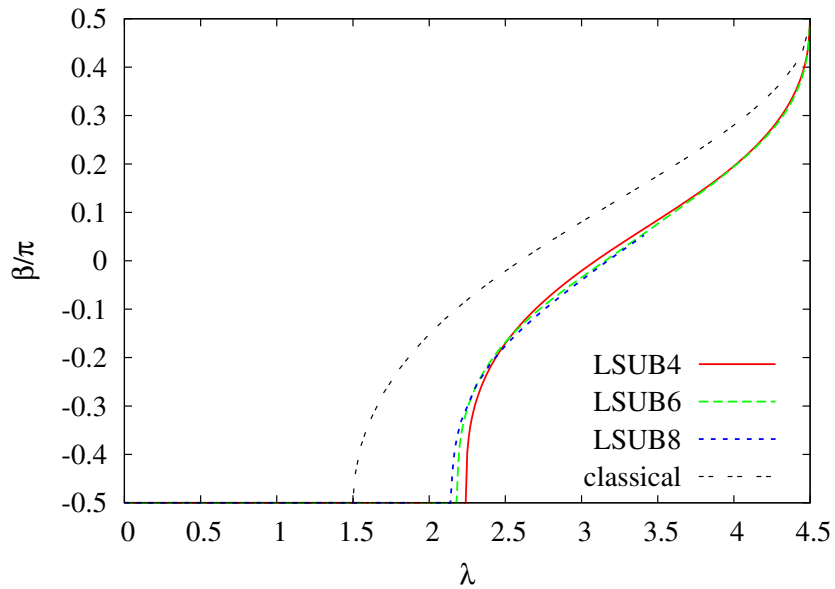


Abbildung 5.14: Darstellung des Quantenwinkels $\frac{\beta}{\pi}$ für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ .

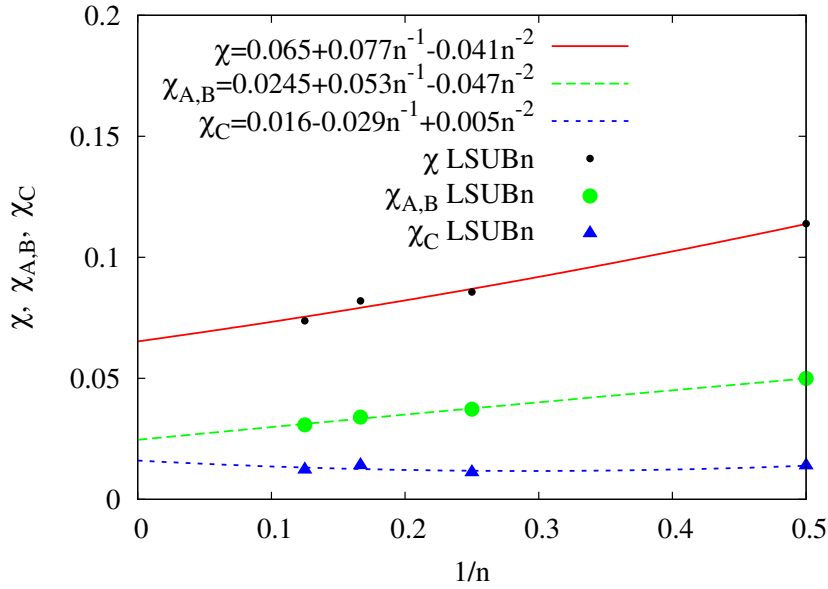


Abbildung 5.15: *LSUB2* bis *LSUB8*-Ergebnisse und Extrapolation der Suszeptibilität $\chi(\lambda \rightarrow 0)$ für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ .

im Vergleich zum Quadratgitter erkennbar unterschiedlichen Beträgen. Diese Abweichungen sind in der weniger optimalen Extrapolation der CCM-Ergebnisse und in der nur bis zur Ordnung $\frac{1}{s}$ durchgeführten Spinwellen-Untersuchung begründet. Für den Fall des Quadratgitters im Magnetfeld wurden diese Berechnungen bis zur Ordnung $\frac{1}{s^2}$ durchgeführt. Wünschenswert sind hier demnach einerseits die zukünftige Berechnung höherer CCM-Näherungsstufen als auch andererseits Spinwellen-Untersuchungen zu höheren Ordnungen in $\frac{1}{s}$.

Wie schon bei den Untersuchungen zum Quadratgitter im Magnetfeld zuvor, sollen hier die Suszeptibilität für ein verschwindendes Magnetfeld $\chi(\lambda \rightarrow 0)$, die Grundzustandsenergie E und die Magnetisierung M als fundamentale Parameter zur Charakterisierung des Grundzustandes des Dreiecksgitters diskutiert werden. Hierzu sind für die Grundzustandsenergie E , die Magnetisierung M und die Spin-Stiffness CCM-Daten für $\lambda = 0$ bereits in [26, 35] zu finden. Für das hier untersuchte Dreiecksgitter im Magnetfeld kann, wie analog zum Quadratgitter zuvor, die Suszeptibilität χ als Funktion des Feldes λ angegeben werden. Wegen des enormen numerischen Aufwandes konnten nur die *LSUB4*- und *LSUB6*-Kurven ermittelt werden. Die Ergebnisse $\chi(\lambda)$ wurden, zusammen mit den im Experiment oft bestimmten Daten $\frac{M}{2\lambda}$, in Bild 5.16 eingetragen. Man erkennt, dass $\chi(\lambda)$ und $\frac{M}{2\lambda}$ bis zum Feld $\lambda = \frac{\lambda_s}{10}$ gut übereinstimmen, um dann signifikant voneinander abzuweichen. Wie beim Quadratgitter, nimmt die Suszeptibilität $\chi(\lambda)$ bis zum Plateauanfang monoton zu. Innerhalb des Plateaus ist $\chi(\lambda)$ Null, was auf ein endliches Anregungsgap in diesem Bereich hinweist. Bei Erreichen des Plateaus bei λ_1 oder λ_2 zeigt die Suszeptibilität $\chi(\lambda)$ eine scharfe Spitze. Solche scharfen Spitzen sind tatsächlich auch bei Materialien wie Cs_2CuBr_4 experimentell gefunden worden (in [112] betrachte man z.B. die Figuren 9 und 10). Zwischen dem Peak bei λ_2 und dem Sättigungsfeld λ_s befindet sich eine breite Region, in der $\chi(\lambda) \approx 0.1$, also recht klein ist. Nahe der Sättigung λ_s wird die Suszeptibilität χ erneut betragsmäßig sehr groß. Die auch hier auftretenden Oszillationen sind ebenfalls Artefakte der *LSUBn*-

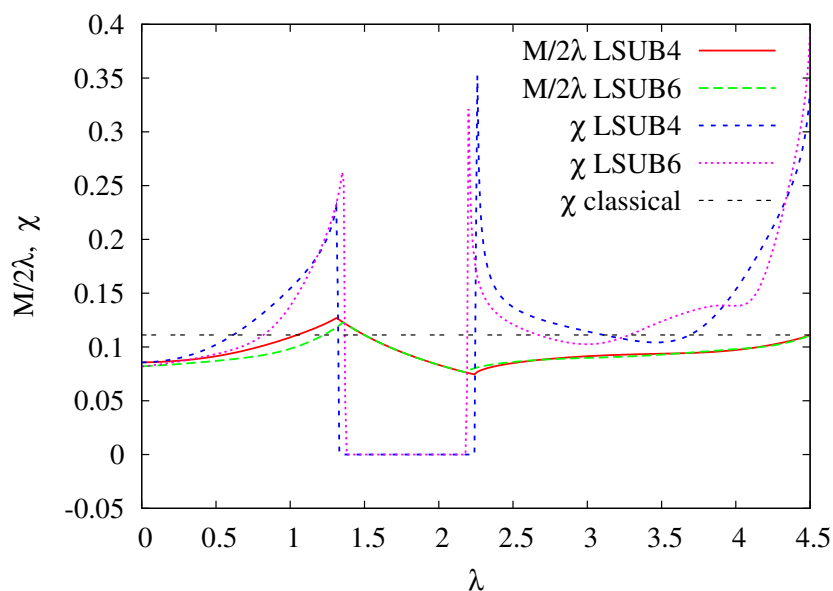


Abbildung 5.16: *LSUB4*- und *LSUB6*-Kurven der Suszeptibilität $\chi(\lambda)$ und der Quotient $\frac{M}{2\lambda}$ für das $s = \frac{1}{2}$ -Dreiecksgitter im Magnetfeld der Stärke λ .

Approximation. Mit wachsendem n nimmt die Anzahl der Oszillationen zu, jedoch die Amplitude ab. Im Limes $n \rightarrow \infty$ wird erwartet, dass die Oszillationen völlig verschwinden.

Kapitel 6

Systeme mit Valence-Bond-Grundzuständen

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, dass mit dem für diese Arbeit verwendeten numerischen CCM-Programmpaket [5] auch Heisenberg-Quantenantiferromagnete untersucht werden können, die sogenannte Valence-Bond- (VB)-Grundzustände besitzen. Hierbei handelt es sich um rotationsinvariante paramagnetische dimer- oder plakettenartige Singulett-Zustände mit einem Spingap zur ersten Triplett-Anregung. Für die Herausbildung dieser VB-Grundzustände sind zum einen Frustration und zum anderen konkurrierende Wechselwirkungen verantwortlich, was im Folgenden zunächst diskutiert werden soll. Beispiele für die Herausbildung von dimer- oder plakettenartigen Singulett-Zuständen durch Frustration findet man in [1, 29, 38, 40, 64, 65, 67, 68, 93, 101, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147]. Gewöhnlicherweise sind VB-Zustände komplizierte Quanten-Vielteilchen-Zustände (siehe z.B. der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem Stern-Gitter [1, 146, 147]). Es gibt jedoch auch bei einigen Systemen Parameterwerte, wo VB-Zustände einfache Produkteigenzustände des zugrundeliegenden Hamilton-Operators sind. Beispiele für solche exakten VB-Produkteigenzustände findet man bei der J_1 - J_2 -Kette (vgl. hierzu auch Abschnitt 4.3) am sogenannten Majumdar-Ghosh-Punkt $J_2/J_1 = 0.5$ [38, 64, 65, 67, 93, 101, 135] und beim Shastry-Sutherland-Modell [1, 29, 40, 68, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145]. Hierbei ist es nützlich, zwischen VB-Grundzuständen zu unterscheiden, welche dieselbe Translationssymmetrie wie der Hamilton-Operator haben und solchen, die spontan die Symmetrie des zugrundeliegenden Gitters brechen. Zur ersten Gruppe gehören beispielsweise das Shastry-Sutherland-Modell und der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem Stern-Gitter und zur zweiten Gruppe die J_1 - J_2 -Kette.

Als eine andere Ursache zur Herausbildung nichtmagnetischer dimer- oder plakettenartiger Zustände, wurde das Vorliegen einer Konkurrenz nichtäquivalenter antiferromagnetischer Nächster-Nachbar-Kopplungen angegeben. Hierdurch können sich lokale Singulettts von zwei (oder vier) gekoppelten Spins herausbilden, falls sich die nichtäquivalenten Nächste-Nachbar-Kopplungen signifikant unterscheiden [1, 28, 136, 148, 149, 150, 151, 152, 153, 154, 155, 156]. Im Gegensatz zur Frustration, welche man auch in klassischen Systemen findet, handelt es sich hier um einen nur in Quantensystemen auftretenden Mechanismus. Die Symmetrie des Grundzustandes ist hierbei analog zu der des Hamilton-Operators. Ein Beispiel hierzu findet man im CAVO-Gitter, mit welchem das magnetische Material CaV_4O_9 theoretisch modelliert wird [136, 148, 149, 150, 151, 152, 153]. Im CAVO-Gitter gibt es zwei nichtäquivalente an-

tiferromagnetische Nächste-Nachbar-Bindungen J' und J . Unterscheiden sich die Bindungen J und J' signifikant, so kann es zur Herausbildung dieser lokalen Singulett-Zustände kommen. Für große J'/J bilden sich lokale Singuletts auf den Dimeren (jeweils zwei zugehörige Spins sind durch J' gekoppelt), wogegen sich für dominante Plaketten-Kopplungen J lokale Singuletts auf den vier-Spin-Plaketten herausbilden (jeweils vier zugehörige Spins sind durch J gekoppelt).

Ein weiteres Beispiel für einen rotationsinvarianten Quanten-Dimer-Zustand findet man im J - J' -Modell auf dem Quadratgitter [28, 154, 155, 156, 157, 158]. Eine Plakette des J - J' -Modells besteht aus vier gekoppelten Spins, wovon drei Bindungen der Stärke J sind und eine Bindung der Stärke J' ist. In beiden Beispielmolekellen, dem CAVO-Gitter und dem J - J' -Modell, zerstört die lokale Singulett-Formierung die langreichweitige Néel-Ordnung (Phasenübergang zweiter Ordnung zwischen dem Néel-Zustand und einem VB-Zustand). Die dann vorliegenden VB-Grundzustände stellen komplexe Vielteilchen-Grundzustände dar, in den Grenzwerten $J'/J \rightarrow \infty$ (CAVO) bzw. $J/J' \rightarrow \infty$ (J - J' -Modell) liegen einfache Produkt-VB-Grundzustände vor.

In den vorangegangenen Kapiteln wurden CCM-Rechnungen mit solchen Modellzuständen durchgeführt, die sich als Produktzustände von Einzelspin-Operatoren darstellen lassen, z.B. kollineare Modellzustände (ferromagnetischer Zustand, Néel-Zustand in den Kapiteln 3 und 4) oder nichtkollineare, spiralartige Zustände (in den Kapiteln 4 und 5). Für diese Kategorie von Modellzuständen wird, wie in den vorangegangenen Kapiteln, der numerische Programmcode [5] verwendet. Dieser bietet auch hier die Möglichkeit, Grundzustandserwartungswerte in hohen CCM-Näherungsstufen computergestützt zu berechnen. In früheren Arbeiten [159] wurden erste CCM-Rechnungen (in niedrigsten Näherungsstufen) unmittelbar auf der Grundlage von Zwei- und Vier-Spin Singulett-Produktzuständen durchgeführt.

Um hier mit einem computergestützten Programmpaket arbeiten zu können, müssten für jedes dieser Probleme wesentliche Programmabläufe neu geschrieben und die Ket-Zustands- sowie Bra-Zustands-Operatoren entsprechend neu definiert und programmiert werden. Diese Prozedur ist zwar prinzipiell umsetzbar, allerdings auch sehr schwierig und zeitaufwändig.

Ziel dieses Kapitels ist es zu zeigen, wie einfache VB-Grundzustände alternativ mittels der CCM auf der Grundlage von Produktzuständen von Einzelspin-Operatoren gefunden werden können.

Im Abschnitt 6.1 wird zunächst der alternative Formalismus zur Beschreibung von VB-Grundzuständen beschrieben, so dass die Berechnungen mit dem vorhandenen Quellcode erfolgen können. Mit dieser Vorgehensweise werden danach die Grundzustände des 1d- J_1 - J_2 -Modells (Abschnitt 6.1.1), des 2d-Shastry-Sutherland-Modells (Abschnitt 6.2) und des 2d-CAVO-Modells (Abschnitt 6.3) im Bereich der Singulett-Formierung untersucht. Die jeweils in diesen Abschnitten gefundenen Resultate werden zusätzlich mit bereits publizierten Ergebnissen aus der Literatur verglichen.

6.1 CCM-Formalismus für VB-Zustände am Beispiel des HAFM auf dem 1d- J_1 - J_2 -Modell

Die Vorgehensweise bei der Verwendung der CCM zur Untersuchung von Quantenspin-systemen wurde im Abschnitt 2.3 ausführlich beschrieben und zu einem Lösungsrezept im Abschnitt 2.3.9 zusammengefasst. Als wichtige Arbeitsschritte wurden die Wahl ei-

nes geeigneten Modellzustandes und eine Koordinatentransformation in Abschnitt 2.3.1 vorgeführt. Die zugrundeliegenden Beispiel-Modellzustände, so wie auch die verwendeten Modellzustände der Kapitel 4 und 5, haben gemeinsam, dass es sich hierbei um einfache Produktzustände von unabhängigen Einzelspin-Operatoren handelt. Nun soll am Beispiel der J_1 - J_2 -Kette gezeigt werden, wie mit Produktzuständen aus Einzelspin-Operatoren VB-Zustände gewonnen werden können.

Im Abschnitt 4.3 wurde gezeigt, dass selbst für Werte der Frustration $J_2 > J_1/4$ für die Beschreibung des Quantensystems der kollineare (translationssymmetrische) Néel-Zustand als Modellzustand geeignet ist (obgleich das eindimensionale Spinsystem keine langreichweitige Fernordnung aufweist). Der für $J_2/J_1 = 0.5$ vorliegende exakte, dimerisierte Grundzustand bricht dagegen die Translationssymmetrie des Gitters und ist zweifach entartet. Um dies zu berücksichtigen, betrachtet man eine vergrößerte, zwei Spins enthaltende Elementarzelle. Die Spins mögen sich bei $(0, 0, 0)$ und bei $(1, 0, 0)$ befinden und der Bravais-Gittervektor sei $(2, 0, 0)$. Für Systeme mit VB-Grundzuständen, welche die Translationssymmetrie des Gitters nicht brechen, ist die Verwendung einer auf diese Weise vergrößerten Elementarzelle nicht erforderlich. Beispiele hierfür sind das Shastry-Sutherland-Modell (Abschnitt 6.2) und das CAVO-Modell (Abschnitt 6.3). Durch Verwendung dieser neuen Elementarzelle können im Rahmen der CCM nun zwei Nächste-Nachbar-Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 unterschieden werden. Der Korrelationskoeffizient a_1 möge hierbei zu der Spinkonfigurationen gehören, welche jeweils zwei Elementarzellen verbindet und der Korrelationskoeffizient a_2 zu jener Spinkonfiguration mit beiden Spins innerhalb der Elementarzelle. In Abbildung 6.1 werden die Elementarzelle und die Konfigurationen der Ket-Korrelationskoeffizienten illustriert. Unter Beachtung der Koordinatentransformation (zur Motivation und Durchführung

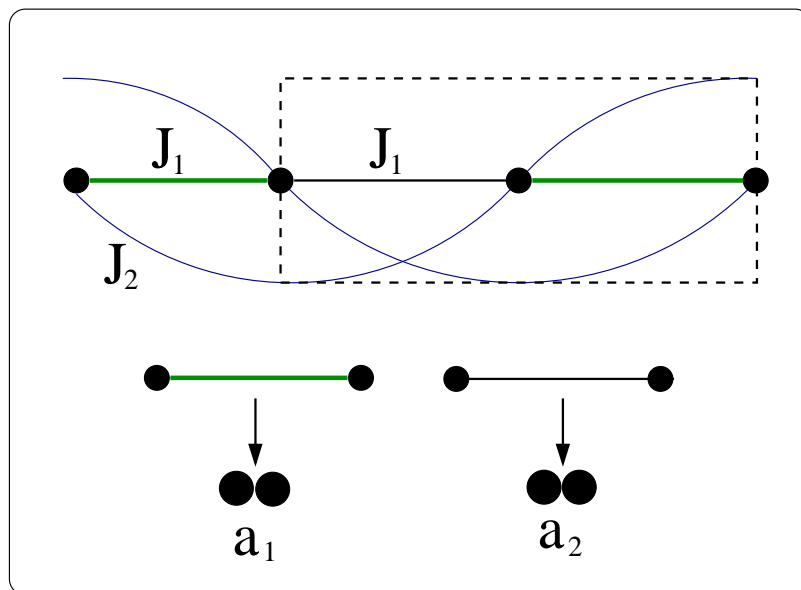


Abbildung 6.1: Illustration der vergrößerten Elementarzelle des J_1 - J_2 -Modells (gestricheltes Rechteck) und der Konfigurationen, denen die Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 zugeordnet sind. Die Spinkonfigurationen sind hierbei analog zu den vorigen Kapiteln mittels schwarzer Kreise dargestellt. Wegen der fehlenden Translationssymmetrie sind hier a priori a_1 und a_2 nicht äquivalent.

siehe Abschnitt 2.3.1), kann man nun mit (2.5) einfache dimerisierte Produktzustände konstruieren, indem man entweder $a_1 = 1$ und $a_2 = 0$ oder $a_1 = 0$ und $a_2 = 1$ setzt, wobei der Korrelationsoperator $S = a_1 \sum_{i_1} s_{i_1}^+ s_{i_1+1}^+ + a_2 \sum_{i_2} s_{i_2}^+ s_{i_2+1}^+$ ist. Die Summen über i_1 laufen hierbei über alle ungeraden und die Summen über i_2 laufen über alle geraden Gitterplätze. Diese Vorgehensweise bricht zum einen die Gittersymmetrie und repräsentiert zum anderen zwei verschiedene, entartete Zustände. Zum Beweis, dass die angegebene Wahl für a_1 und a_2 zu dimerisierten Produktzuständen führt, betrachtet man:

$$|\Psi\rangle = e^{S_2} |\Phi\rangle = e^{(a_1 s_1^+ s_2^+ + a_2 s_2^+ s_3^+ + a_1 s_3^+ s_4^+ + a_2 s_4^+ s_5^+ + \dots)} |\Phi\rangle. \quad (6.1)$$

Mit der Wahl $a_1 = 1$ und $a_2 = 0$ folgt nun:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^{(s_1^+ s_2^+ + s_3^+ s_4^+ + s_5^+ s_6^+ + \dots)} |\Phi\rangle \\ &= (1 + s_1^+ s_2^+) (1 + s_3^+ s_4^+) (1 + s_5^+ s_6^+) \dots |\Phi\rangle \\ &= \{ |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle + |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle \} \otimes \{ |\downarrow_3 \downarrow_4\rangle + |\uparrow_3 \uparrow_4\rangle \} \otimes \dots, \end{aligned} \quad (6.2)$$

wobei die Symbole $|\downarrow_i\rangle$ und $|\uparrow_i\rangle$ einen Down-Spin bzw. einen Up-Spin am Platz i kennzeichnen. In (6.2) wurde $(s_i^+)^2 |\Phi\rangle = 0$ verwendet, was für die hier betrachteten Spin- $\frac{1}{2}$ -Systeme gültig ist¹.

Rotiert man die Achsen des lokalen Koordinatensystems der Down-Spins so, dass aus diesen Down-Spins wieder Up-Spins werden, dann wird (6.2) der bekannte Dimer-Singulett-Produktzustand $(|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle)$ (ohne Berücksichtigung der Normierung) für benachbarte Gitterplätze i und j . Wenn ein solcher Produktzustand ein exakter Eigenzustand eines gegebenen Problems wird (z.B. für $J_2/J_1 = 0.5$ bei der hier betrachteten J_1 - J_2 -Kette), so ist in jeder CCM-Näherungsstufe $LSUBn$ mit $n > 2$ entweder $a_1 = 1$ und $\{a_L = 0 | \forall L : L \neq 1\}$ (also auch inklusive aller Korrelationskoeffizienten, die zu größeren Konfigurationen n gehören) oder $a_2 = 1$ und $\{a_L = 0 | \forall L : L \neq 2\}$ stets eine gültige Lösung des relevanten Ket-Gleichungssystems (2.11). Somit kann zum Auffinden des VB-Grundzustandes der Néel-Modellzustand weiter verwendet werden. Im Folgenden soll zur Unterscheidung der unterschiedlichen Vorgehensweisen folgende Fälle vereinbart werden:

- **Fall a:** Verwendung des Néel-Modellzustandes und der einfachen Elementarzelle (ein Spin). Die zugehörige Lösung wird im Folgenden auch als die néelartige Lösung bezeichnet. Hierbei sind die Nächsten-Nachbar-Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 stets gleich.
- **Fall b:** Verwendung des Néel-Modellzustandes auf der vergrößerten Elementarzelle zum Auffinden des dimerisierten VB-Grundzustandes. Die zugehörige Lösung wird im Folgenden auch als die dimerisierte Lösung bezeichnet. Hierbei werden die Nächsten-Nachbar-Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 unterschieden.

Für den Bra-Zustand soll zunächst festgehalten werden, dass der zu (6.2) analoge dimerisierte Bra-Produktzustand in rotierten Koordinaten wie folgt lauten sollte:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | &= \{ \langle \downarrow_1 \downarrow_2 | + \langle \uparrow_1 \uparrow_2 | \} \otimes \{ \langle \downarrow_3 \downarrow_4 | + \langle \uparrow_3 \uparrow_4 | \} \otimes \dots \\ &= \{ \langle \downarrow_1 \downarrow_2 \downarrow_3 \downarrow_4 \downarrow_5 \downarrow_6 \dots | + \langle \downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3 \uparrow_4 \downarrow_5 \downarrow_6 \dots | \\ &+ \dots + \langle \downarrow_1 \downarrow_2 \uparrow_3 \uparrow_4 \uparrow_5 \uparrow_6 \uparrow_7 \uparrow_8 \dots | + \dots + \langle \uparrow_1 \uparrow_2 \uparrow_3 \uparrow_4 \uparrow_5 \uparrow_6 \uparrow_7 \uparrow_8 \dots | \}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

¹Man erkennt an (6.2), dass der Zustand nicht normiert ist. Die Normierungsbedingung $\langle \Phi | \Psi \rangle = 1$ ist allerdings erfüllt.

Für die Wirkung der Spinoperatoren s^+ und s^- auf die Zustände $\langle \uparrow |$ und $\langle \downarrow |$ gelten die Gleichungen:

$$\langle \downarrow | s^+ = 0, \quad \langle \uparrow | s^- = 0, \quad \langle \downarrow | s^- = \langle \uparrow |, \quad \langle \uparrow | s^+ = \langle \downarrow |. \quad (6.4)$$

Man erkennt, dass wegen der Linearität des Bra-Korrelationsoperators (2.6) der Bra-Grundzustand in $LSUBn$ maximal n Up-Zustände beinhalten kann. Für endliche n kann im Gegensatz zum Ket-Zustand hier also kein einfacher Produktzustand zum Auffinden des dimerisierten Bra-Grundzustandes konstruiert werden².

Die Magnetisierung (2.15) wird für den einfachen dimerisierten Produktansatz ($a_1 = 1$ und $\{a_L = 0 | \forall L : L \neq 1\}$) gegeben durch:

$$M = \frac{1}{2} - 2\tilde{a}_1 \quad (6.5)$$

und ist von nur einem Bra-Korrelationskoeffizienten abhängig.

6.1.1 Anwendung des Formalismus auf das 1d- J_1 - J_2 -Modell

Der Hamilton-Operator des J_1 - J_2 -Modells (4.1) mit $J_\perp = 0$ wurde bereits in Kapitel 4 angegeben. Einige grundlegende Eigenschaften des Modells wurden dort ebenfalls diskutiert. Zum Zwecke der besseren Lesbarkeit dieses Kapitels sollen hier die wichtigsten bekannten Resultate zum J_1 - J_2 -Heisenberg-Antiferromagneten auf der linearen Kette noch einmal zusammengetragen werden.

Die Grundzustandseigenschaften dieses Systems wurden bereits mit verschiedenen Vielteilchen-Methoden wie der ED [65, 135], der DMRG [62, 64, 93, 101], der CCM [25, 94, 159, 160] und mittels feldtheoretischer Methoden [64] untersucht (siehe [38, 64] für einen Überblick). Die vorangegangenen CCM-Untersuchungen [94, 160] wurden unter Verwendung von Produktmodellzuständen unabhängiger Einzelspin-Operatoren durchgeführt, welche ebenfalls die Symmetrie des Gitters besitzen. Die zuvor beschriebene Vorgehensweise zum Auffinden von VB-Grundzuständen mit solchen CCM-Modellzuständen wurde jedoch nicht genutzt.

Für die Untersuchungen in diesem Kapitel wird im Hamilton-Operator (4.1) J_1 fixiert zu $J_1 = 1$ und der Fall $J_2 > 0$ betrachtet. Am Punkt $J_2/J_1 = 0$ handelt es sich um einen unfrustrierten Heisenberg-Antiferromagneten für den es die exakte Bethe-Lösung gibt. Der Grundzustand ist gaplos und die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle$ fallen langsam entsprechend eines Potenzgesetzes mit dem Abstand auf Null ab, d.h. der Grundzustand weist keine langreichweitige Ordnung auf. Für $J_2/J_1 > 0$ konkurrieren die Austauschwechselwirkungen zu den nächsten Nachbarn (J_1) und zu den übernächsten Nachbarn (J_2), weswegen das System frustriert ist. Bei $J_2/J_1 = 0.2411$ beginnt ein Phasenübergang zu einem zweifach entarteten, dimerisierten Zustand mit einer Anregungslücke zum Triplettzustand und exponentiellem Abklingen der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen [38, 64, 93, 135]. Dieser Zustand bricht die Gittersymmetrie. Für $J_2/J_1 = 0.5$, am sogenannten Majumdar-Ghosh-Punkt, gibt es zwei exakte dimerisierte Singulett-Produktzustände analog zum Zustand (6.2).

²Mit dem im Abschnitt 2.1.1 durch (2.16) gegebenen Ansatz der *erweiterten* CCM tritt dieses Problem nicht auf, da sowohl für den Ket- als auch für den Bra-Zustand ein exponentieller Ansatz verwendet wird. Hierzu können allerdings im Rahmen dieser Arbeit keine weitergehenden Aussagen getroffen werden.

Im vorigen Abschnitt 6.1 wurde beschrieben, wie dieses Modell in der dimerisierten Phase (Fall b) mittels der CCM auf der Grundlage eines Néel-Modellzustandes untersucht werden kann. Da für die dortige Beschreibung schon das J_1 - J_2 -Modell selbst verwendet wurde, können die entsprechenden Notationen und Definitionen (vergrößerte Elementarzelle, Korrelationskoeffizienten) unmittelbar übernommen werden. Den exakten Grundzustand (6.2) bei $J_2/J_1 = 0.5$ erhält man durch explizites Setzen von $a_1 = 1$ und $\{a_L = 0 | \forall L : L \neq 1\}$ im CCM-Programm. Startet man auf diese Weise bei $J_2/J_1 = 0.5$ innerhalb einer gewählten $LSUBn$ -Näherung und verkleinert das Verhältnis J_2/J_1 (durch Reduzierung der frustrierenden Wechselwirkung J_2), so kann man diese Lösung gewissermaßen in den neuen Parameterbereich "mitschleifen". Abbildung 6.2 zeigt den Verlauf der Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 in der Näherungsstufe $LSUB12$. Man erkennt in 6.2, dass die exakte dimerisierte Produktzustands-Lösung

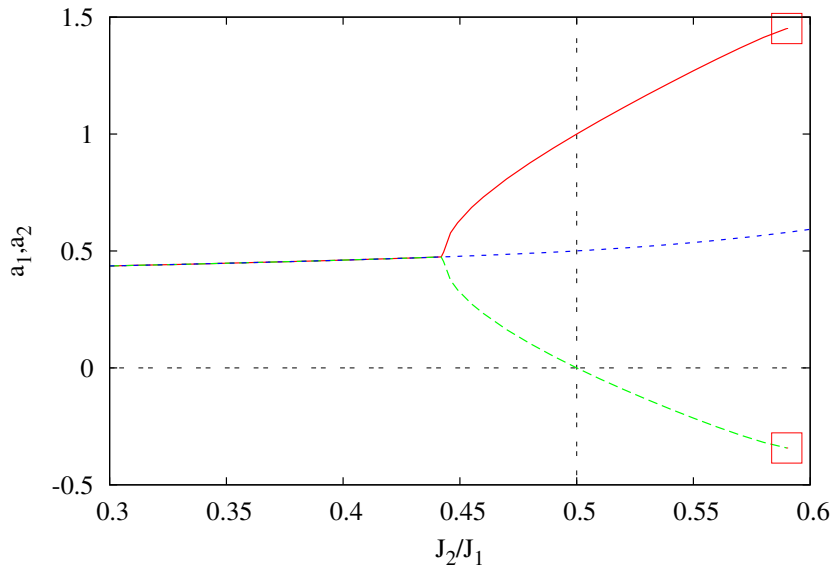


Abbildung 6.2: Darstellung der Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 in der Näherungsstufe $LSUB12$ für das J_1 - J_2 -Modell auf der linearen Kette. Der Verlauf der Ket-Korrelationskoeffizienten a_1 und a_2 im Bereich der symmetriebrechenden, dimerisierten Lösung (Fall b) ist durch die rote bzw. durch die grüne Kurve dargestellt. Die Ergebnisse für die néelartige Lösung (Fall a) werden durch die blaue Kurve dargestellt. Unterhalb des kritischen Punktes (Bifurkation) bei $J_2/J_1|_{c_i}$ gibt es nur die Lösung $a_1 = a_2$. Am Punkt $J_2/J_1|_t$, hier mittels kleiner Kästchen gekennzeichnet, endet der Bereich, für den es reelle Lösungen des CCM-Gleichungssystems gibt.

($a_1 = 1$ und die anderen Koeffizienten $\{a_L\} = 0$) in $LSUB12$ (und auch in allen anderen Näherungsstufen $LSUBn$ (> 2), ohne Abbildung) für $J_2/J_1 = 0.5$ gefunden wird. Für $J_2/J_1 < 0.5$ findet man weiterhin einen Grundzustand, der die Gittersymmetrie bricht. Dieser dimerisierte Grundzustand weicht jedoch von dem einfachen dimerisierten Zustand bei $J_2/J_1 = 0.5$ ab. Der Korrelationskoeffizient a_1 ist somit von $a_1 = 1$ verschieden und weitere Korrelationskoeffizienten $\{a_L\}$ besitzen nun Werte ungleich Null. Unterhalb eines kritischen Wertes $J_2/J_1|_{c_i}$ gibt es nur die Lösung $a_1 = a_2$ und der zugehörige Grundzustand besitzt die Translationssymmetrie des Gitters. Diese Lösung wird auch deshalb als die gewöhnliche, néelartige Lösung bezeichnet, weil zuvor durch-

geführte CCM-Untersuchungen [159, 160] für das J_1 - J_2 -Modell nur diesen Fall ohne gebrochene Symmetrie betrachtet haben. Für Werte $J_2/J_1 > 0.5$ findet man einen Punkt $J_2/J_1|_t$, wo das CCM-Gleichungssystem keine reelle Lösung mehr besitzt. Die CCM-Ergebnisse zeigen hier also, dass die dimerisierte Phase nur innerhalb einer bestimmten Region J_2/J_1 anzutreffen ist, was mit den Ergebnissen anderer Methoden übereinstimmt (siehe hierzu [38, 64, 93]). Qualitativ ähnliche Resultate wurden mit den anderen betrachteten Näherungsstufen $LSUBn$ mit $n < 12$ ermittelt. Die kritischen Werte $J_2/J_1|_{c_1}$ und $J_2/J_1|_t$ wurden zusätzlich zu $LSUB12$ innerhalb der Näherungsstufen $LSUBn$ für $n = 2, 4, 6, 8, 10$ bestimmt und in Tabelle 6.1 eingetragen. Offensichtlich nähert sich insbesondere der kritische Punkt $J_2/J_1|_{c_1}$, wenn auch recht

Tabelle 6.1: CCM Ergebnisse für die Bereichsgrenzen der dimerisierten Phase des J_1 - J_2 -Modells.

Näherungsstufe	$J_2/J_1 _{c_1}$	$J_2/J_1 _t$
<i>LSUB2</i>	0.4761	–
<i>LSUB4</i>	0.4745	0.5576
<i>LSUB6</i>	0.4637	–
<i>LSUB8</i>	0.4568	0.7410
<i>LSUB10</i>	0.4498	0.6404
<i>LSUB12</i>	0.4429	0.5956

langsam und mit signifikant zu großen kritischen Werten, dem bekannten kritischen Punkt $J_2/J_1 = 0.2411$ [38, 93] mit zunehmender Näherungsstufe $LSUBn$ an. In [64] wurde gezeigt, dass für $J_2/J_1 < 0.4$ das Spingap sehr klein ist. Hier ist es deswegen nicht verwunderlich, dass die dimerisierte Phase für $J_2/J_1 < 0.4$ mittels der CCM für $n \leq 12$ in $LSUBn$ nicht gefunden wird. Der für $J_2/J_1 > 0.5$ gefundene Punkt $J_2/J_1|_t$, wo das CCM-Gleichungssystem keine reelle Lösung mehr besitzt, kann durch das Auftreten von nichtkollinearen, inkommensurablen, spiralartigen Spin-Spin-Korrelationen zustandekommen, die nicht mit dem hier gewählten Modellzustand darstellbar sind. Man beachte hierzu die Untersuchungen in Kapitel 4 und [25, 62, 64, 65, 94].

Eine Darstellung der Nächsten-Nachbar-Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 und \tilde{a}_2 in der Näherungsstufe $LSUB12$ findet man in Bild 6.3. Der Wert des Nächsten-Nachbar-Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 beträgt in allen $LSUBn$ (mit $n > 2$) $\tilde{a}_1 = 0.25$. Die Lösungen für \tilde{a}_1 befinden sich innerhalb der Region $J_2/J_1|_{c_1} < J_2/J_1 < J_2/J_1|_t$ stets in der Nähe von $\tilde{a}_1 = 0.25$. Für $J_2/J_1 \rightarrow J_2/J_1|_{c_1}$ divergieren die Nächsten-Nachbar-Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 und \tilde{a}_2 . Für $J_2/J_1 < J_2/J_1|_{c_1}$ gibt es wieder nur die néelartige Lösung $\tilde{a}_1 = \tilde{a}_2$ und für $J_2/J_1 > J_2/J_1|_t$ findet man keine Lösungen des CCM-Gleichungssystems. Erneut liefern die hier nicht explizit illustrierten Näherungsstufen der CCM für $n \leq 12$ in $LSUBn$ vergleichbare Ergebnisse.

Nun soll die Grundzustandsenergie des hier betrachteten Spinsystems innerhalb der dimerisierten Phase untersucht werden. Hierzu wurden in Abbildung 6.4 die Grundzustandsenergie für CCM-Rechnungen auf der Basis von Fall a und auf der Basis von Fall b eingetragen. Man kann der Abbildung 6.4 zunächst entnehmen, dass die exakte Grundzustandsenergie $E = -0.375$ für $J_2/J_1 = 0.5$ wiedergegeben wird. In diesem Punkt liefert die néelartige CCM-Lösung ($a_1 = a_2$) eine tieferliegende Grundzustandsenergie. Zur Begründung dieses Verhaltens kann man zwei Argumente anbringen. Zum einen ist die Wahl des zugehörigen Néel-Modellzustandes (Fall a) für die Region um

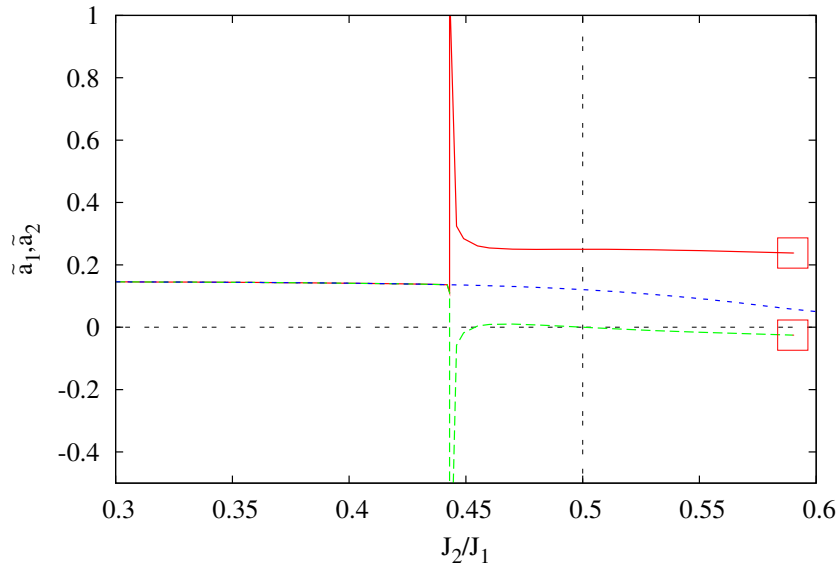


Abbildung 6.3: Darstellung der Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 und \tilde{a}_2 in der Näherungsstufe *LSUB12* für das J_1 - J_2 -Modell auf der linearen Kette. Der Verlauf der Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 und \tilde{a}_2 im Bereich der symmetriebrechenden, dimerisierten Lösung (Fall b) ist durch die rote bzw. durch die grüne Kurve dargestellt. Die Ergebnisse für die néelartige Lösung (Fall a) werden durch die blaue Kurve dargestellt. Unterhalb des kritischen Punktes (Bifurkation) bei $J_2/J_1|_{c_l}$ gibt es nur die Lösung $\tilde{a}_1 = \tilde{a}_2$. Am Punkt $J_2/J_1|_t$, hier mittels kleiner Kästchen gekennzeichnet, endet der Bereich, für den es Lösungen des CCM-Gleichungssystems gibt.

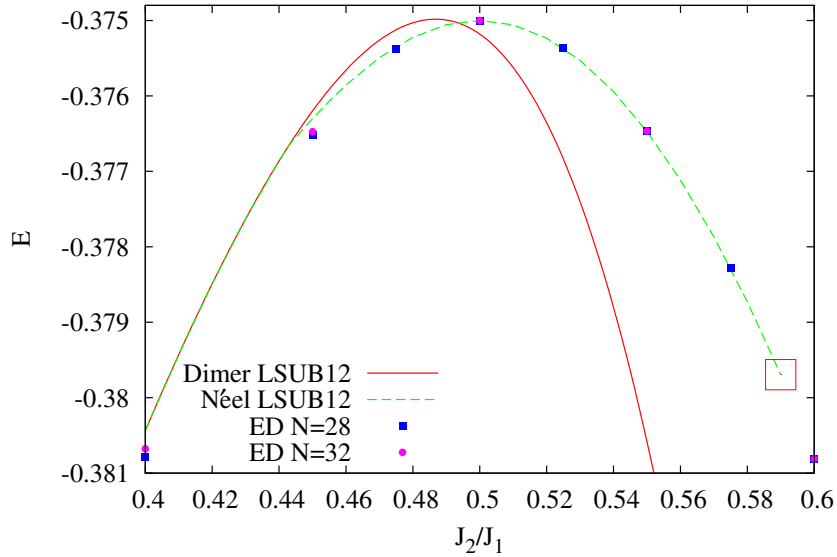


Abbildung 6.4: Darstellung der Grundzustandsenergie in der Näherungsstufe *LSUB12* für das J_1 - J_2 -Modell auf der linearen Kette. Dargestellt sind die néelartigen Lösungen (Fall a) und die dimerisierten Lösungen (Fall b). Ergebnisse der exakten Diagonalisierung für $N = 28$ und für $N = 32$ sind ebenfalls eingetragen. Der Punkt $J_2/J_1|_t$, für den es keine Lösungen des CCM-Gleichungssystems mehr gibt, wurde erneut mit einem Kästchen gekennzeichnet.

$J_2/J_1 = 0.5$ ungünstig und zum anderen zeigen sich hier die Konsequenzen, dass es sich bei der CCM um keine variationelle Methode handelt (vgl. hierzu auch Abschnitt 2.1.1).

Die Lösungen unter Verwendung des Produktmodellzustandes zum Auffinden des dimerisierten Grundzustandes (Fall b) und die Ergebnisse der ED für $N = 28$ und für $N = 32$ stimmen zudem sehr gut überein, was zeigt, dass die dimerisierte Phase auf diese Weise besser beschrieben werden kann.

Die Untergitter-Magnetisierung M wurde ebenfalls bestimmt. Die Ergebnisse in den Näherungsstufen *LSUB8*, *LSUB10* und *LSUB12* findet man in Abbildung 6.5.

Es ist bekannt, dass die J_1 - J_2 -Kette im Grundzustand für $J_2 \geq 0$ nicht ferngeordnet und der wahre Wert der Magnetisierung $M = 0$ ist. Von früheren CCM-Rechnungen an diesem Modell [27, 160, 25, 94] ist bekannt, dass in den einzelnen CCM-Näherungsstufen durchaus von Null verschiedene, jedoch mit zunehmender Näherungsstufe immer kleiner werdende Magnetisierungen ermittelt werden. Das richtige Resultat $M = 0$ kann durch eine anschließende Extrapolation $n \rightarrow \infty$ der *LSUBn*-Ergebnisse bestimmt werden (siehe [25, 94] und auch Abbildung 4.20). Damit ist zu verstehen, warum auch für $J_2/J_1 < J_2/J_1|_{c_l}$ Werte $M \neq 0$ gefunden werden. Es ist allerdings auch zu sehen, dass eine Vergrößerung der Frustration J_2 erwartungsgemäß die Magnetisierung schwächt. Interessanter ist jedoch das diskontinuierliche Verhalten der Magnetisierung bei $J_2/J_1|_{c_l}$ (Fall b). Die Diskontinuität stammt hierbei ausschließlich vom Verhalten der Bra-Korrelationskoeffizienten (siehe Abbildung 6.3). Bis zu $J_2/J_1 > J_2/J_1|_{c_l}$ bleiben die entsprechenden *LSUB10* und *LSUB12*-Ergebnisse in der gesamten Region $J_2/J_1|_{c_l} < J_2/J_1 < J_2/J_1|_t$ nahe Null (in *LSUB8* gibt es einen kleinen Bereich

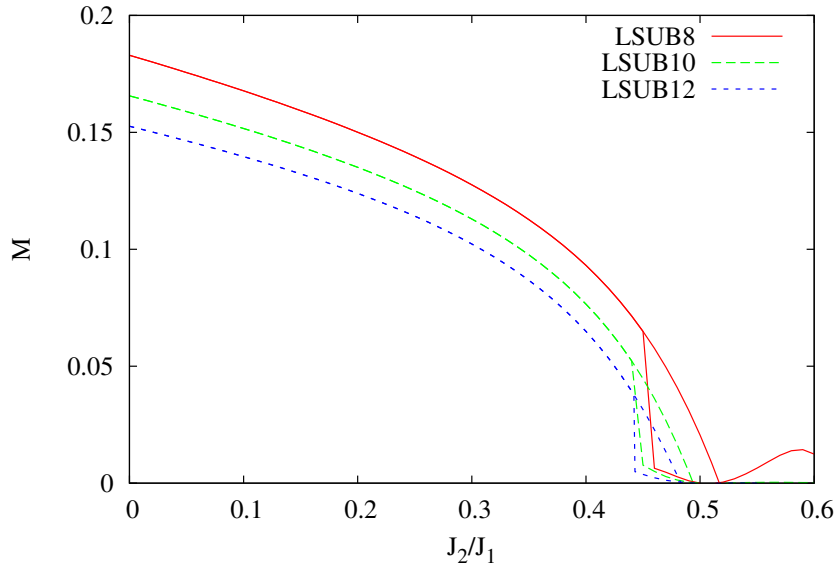


Abbildung 6.5: Darstellung der Untergitter-Magnetisierung M in den Näherungsstufen $LSUB8$, $LSUB10$ und $LSUB12$ für das J_1 - J_2 -Modell auf der linearen Kette. Unterhalb der kritischen Punkte $J_2/J_1|_{c_l}$ stimmen die néelartigen Lösungen (Fall a) und die dimerisierten Lösungen (Fall b) überein. Bei $J_2/J_1|_{c_l}$ zeigen die Magnetisierungskurven im Fall b (dimerisierte Lösungen) eine Diskontinuität, wogegen die Magnetisierungskurven im Fall a (néelartige Lösungen) kontinuierlich bleiben. Oberhalb von $J_2/J_1|_{c_l}$ sind dimerisierten Lösungen für die Magnetisierungen kleiner als die néelartigen Lösungen, mit Ausnahme einer kleinen Region in der Näherungsstufe $LSUB8$.

für $J_2/J_1 > 0.5$, wo die Magnetisierung etwas von Null abweicht). Die in diesem Bereich kontinuierlich verlaufende Magnetisierungskurve der néelartigen Lösung ist immer oberhalb der Kurve der dimerisierten Lösung, was ebenfalls ein Hinweis darauf ist, dass der Produktmodellzustand zum Auffinden der dimerisierten Lösung die vorzuziehende Wahl darstellt, da dieser die Physik des Systems besser beschreibt. Am Majumdar-Ghosh-Punkt $J_2/J_1 = 0.5$ selbst, ist die Magnetisierung aller *LSUBn*-Kurven, bestimmt mit dem dimerisierten Produktmodellzustand, exakt Null.

Zusammenfassend soll angemerkt werden, dass die hier dargestellten Ergebnisse eine Eignung der CCM zur Detektion von spontanen Symmetriebrechungen zeigen. Besonders bei der Untersuchung von zwei- oder dreidimensionalen Systemen kann dies interessant werden, da mit alternativen Methoden weniger genau (ED) oder gar nicht (DMRG) gearbeitet werden kann.

6.2 Das Shastry-Sutherland-Modell

Ein weiteres Modell, welches eine dimerisierte Phase im Grundzustand besitzt, ist das Shastry-Sutherland-Modell [68]. Hierbei handelt es sich um ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Modell auf einem Quadratgitter mit der Bindung J_1 zu den nächsten Nachbarn und mit einer antiferromagnetischen Bindung J_2 zu den übernächsten Nachbarn in jeder zweiten (quadratischen) Plakette. Bild 6.6 illustriert das Shastry-Sutherland-Modell. Für

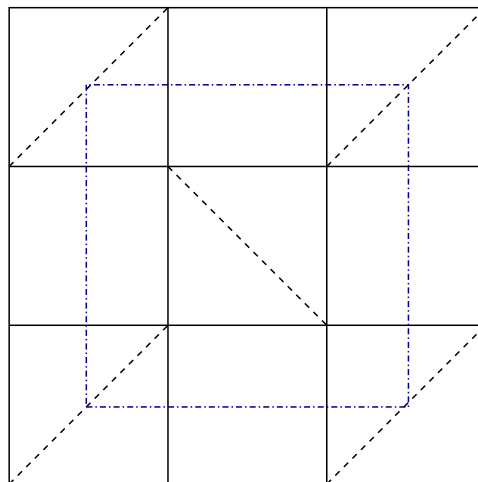


Abbildung 6.6: Darstellung des Shastry-Sutherland-Modells. Die geometrische Elementarzelle, bestehend aus vier Spins, ist durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet. J_1 ist hierbei die Bindungsstärke zwischen benachbarten Spins und J_2 die Bindungsstärke zwischen den Spins entlang einer diagonalen Bindung.

$J_1 = J_2$ ist dieses Modell zu einem Heisenberg-Modell auf einem der elf Archimedischen Gitter äquivalent [1]. Das Interesse am Shastry-Sutherland-Modell wurde durch die Untersuchungen am Material $\text{SrCu}(\text{BO}_3)_2$, welches einer Realisierung des theoretischen Modells sehr Nahe kommt, erneut angeregt [1, 136]. Für kleine Werte $J_2/J_1 \ll 1$ und große Werte $J_2/J_1 \gg 1$ der Frustration ist dieses Modell gut verstanden, während das Verhalten im Zwischenbereich $J_2/J_1 \approx 1$ Gegenstand aktueller Diskussionen ist. Wie im Fall des J_1 - J_2 -Modells gibt es auch hier, wie bereits weiter oben diskutiert wurde, eine Parameterregion mit einem exakten dimerisierten Singulett-Grundzustand. Im

Gegensatz zur J_1 - J_2 -Kette besteht dieser Zustand jedoch aus einem Produkt von Dimeren auf den Übernächsten-Nachbar-Bindungen J_2 und bricht die Translationssymmetrie des Gitters nicht.

Zuvor wurde dieses Modell mittels Schwinger-Boson-Molekularfeld-Theorie [136], ED [1, 137, 138], Reihenentwicklung [40, 139, 140, 141], Renormalisierungsgruppen-Theorie [141], eichtheoretischer Ansätze [142] und der CCM [25, 29] untersucht. Einen aktuellen Überblick hierzu findet man in [143]. Von diesen Untersuchungen her ist bekannt, dass sich das Quantensystem für $J_2 < J_1$ ähnlich zum klassischen System verhält. Man findet einen halbklassischen, néelartig ferngeordneten Grundzustand. Für $J_2 > J_2^c$ mit $J_2^c \approx (1.465 \pm 0.025)J_1$ findet man im Grundzustand einen dimerisierten Zustand mit Dimeren entlang der diagonalen Bindungen (gekennzeichnet durch gestrichelte Linien in 6.6). Die Grundzustandsenergie pro Spin des dimerisierten Singulett-Produktzustandes beträgt $E_{dimer} = -3J_2/8$. Beim Shastry-Sutherland-Modell ist der Übergang aller Wahrscheinlichkeit nach (und im Unterschied zur J_1 - J_2 -Kette) von erster Ordnung. Die Vorgehensweise zur Untersuchung dieses Modells im Rahmen der CCM wurde detailliert in [29] beschrieben. In [29] wurde als Modellzustand der Néel-Zustand mit antiparallelen Nächsten-Nachbar-Spins gewählt, was gute Resultate in der Region $J_2/J_1 < 1.6$ lieferte.

Hier soll gezeigt werden, dass auch für dieses Modell ein einfacher dimerisierter Produkt-Ketzustand ein Resultat der CCM-Rechnungen ist. Dafür wird ein sogenannter kollinearer Produktmodellzustand verwendet, für den die Spins Übernächster-Nachbarn antiparallel (entsprechend der Bindung J_2) ausgerichtet sind. Die Up- und Down-Spins bilden alternierend angeordnete Reihen [161, 162, 163, 164, 165]. Im Folgenden soll dieser Modellzustand als Reihen-Modellzustand bezeichnet werden. Für die folgenden Betrachtungen wird $J_1 = 1$ gesetzt und $J_2 > 0$ ist der Parameter des Systems. Passend zum Reihen-Modellzustand können hier den Dimeren entlang der diagonalen Bindungen passende Ket-Korrelationskoeffizienten zugeordnet werden. Setzt man diese Korrelationskoeffizienten gleich (einheitlicher Startwert 1) und alle anderen Koeffizienten Null, so kann der exakte dimerisierte Produkt-Grundzustand im dimerisierten Regime $J_2 > J_2^c$ dargestellt werden. Diese CCM-Lösung existiert für alle $J_2/J_1 > 0$, weil dieser Zustand ein Eigenzustand für alle Werte J_1 und J_2 ist. Die Grundzustandsenergie ist jedoch nur für größere J_2 niedrig genug, damit dieser Zustand der Grundzustand wird. Die CCM findet mit diesem Modellzustand die korrekte (exakte) Grundzustandsenergie von $E = -0.375J_2$. In Bild 6.7 ist der Verlauf der Grundzustandsenergie für den Reihen-Modellzustand und für den Néel-Modellzustand in Abhängigkeit von J_2/J_1 dargestellt. Wie in [166] findet man einen Schnittpunkt zwischen den Energiekurven des Néel-Modellzustandes und des Reihen-Modellzustandes bei $J_2/J_1 \approx 1.48$.

Die Bra-Korrelationskoeffizienten für die Übernächsten-Nachbar-Korrelationskoeffizienten entlang der Diagonalen (sowie auch viele andere Bra-Korrelationskoeffizienten in den einzelnen $LSUBn$) divergieren für $J_2/J_1 \rightarrow 1$ an einem kritischen Punkt, wie in Abbildung 6.8 zu sehen ist. Diese kritischen Punkte bei $J_1/J_2 = 1.059$ ($SUB2 - 4$), $J_1/J_2 = 1.243$ ($LSUB4$) und $J_1/J_2 = 1.397$ ($LSUB6$) betreffen nur die Bra-Korrelationskoeffizienten und sind eine alleinige Eigenschaft des Bra-Zustandes. Für die Ket-Korrelationskoeffizienten findet man hier keinen dementsprechenden kritischen Punkt. Die Zahlenwerte für diese kritischen Punkte J_1/J_2 liegen also in der Nähe des Phasenübergangspunktes $J_2^c \approx (1.465 \pm 0.025)J_1$. Es kann hier vermutet werden, dass bei Hinzunahme höherer Näherungsstufen $LSUBn$ sowohl der Schnittpunkt zwischen der Energiekurve des Néel-Modellzustandes und der des Reihen-Modellzustandes als

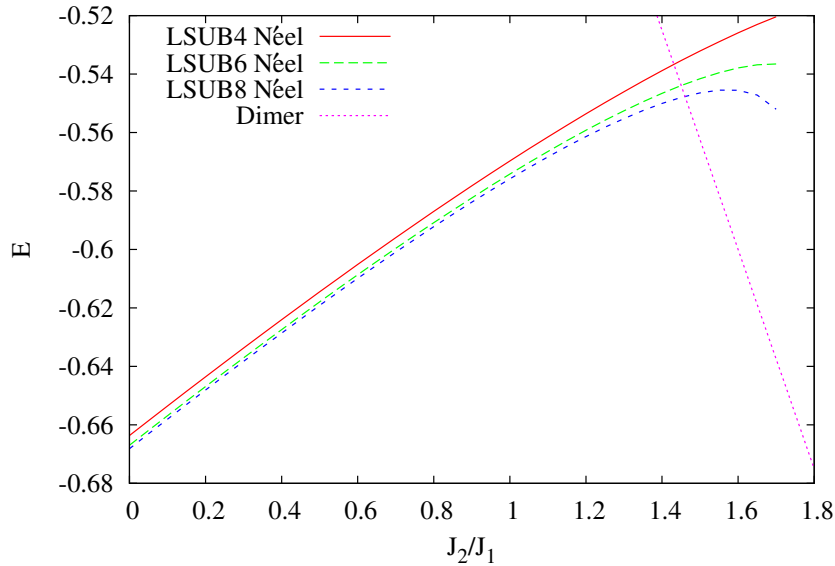


Abbildung 6.7: Darstellung der CCM-Grundzustandsenergie E für das Spin- $\frac{1}{2}$ -Shastry-Sutherland-Modell ($J_1 = 1$) mittels des Néel-Modellzustandes und des Reihen-Modellzustandes in *LSUB4*, *LSUB6* und *LSUB8*. Für den Reihen-Modellzustand wird die exakte Grundzustandsenergie in allen Näherungsstufen *LSUBn* mit $n > 2$ gefunden.

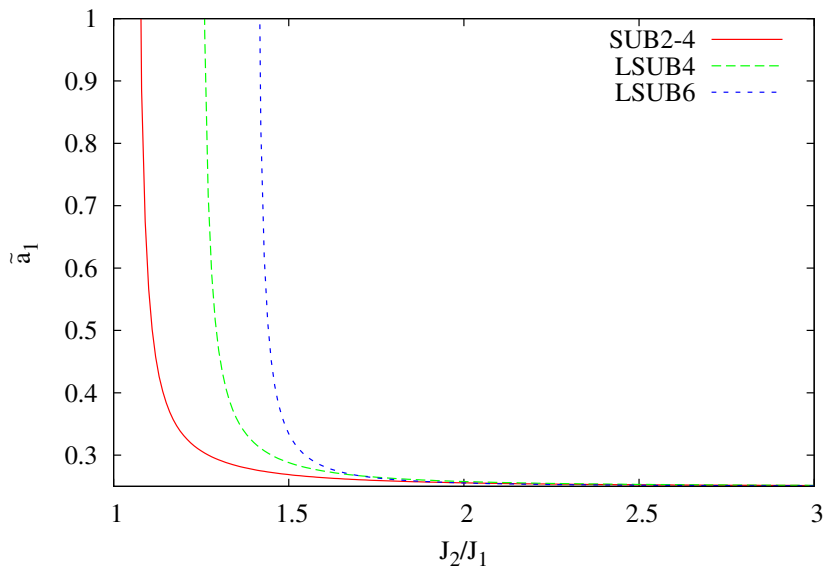


Abbildung 6.8: Darstellung der Bra-Korrelationskoeffizienten für das Spin- $\frac{1}{2}$ -Shastry-Sutherland-Modell ($J_1 = 1$) mittels des Reihen-Modellzustandes. Dargestellt ist der Verlauf jener Bra-Korrelationskoeffizienten, die zu Spinkonfigurationen gehören, welche die Dimere verbinden.

auch der kritische Punkt, wo die Bra-Korrelationskoeffizienten (und damit auch die Magnetisierung) divergieren, sich in einem gemeinsamen Punkt, dem Phasenübergangspunkt, treffen werden.

Die Ergebnisse der Magnetisierung M bei Verwendung des Reihen-Modellzustandes sind in Abbildung 6.9 dargestellt. Für alle J_2/J_1 ist M negativ. Der tatsächliche Wert

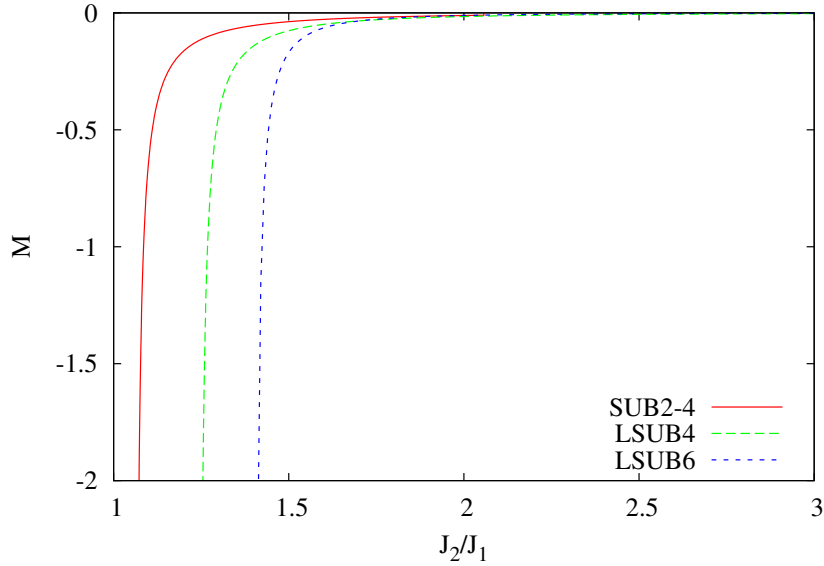


Abbildung 6.9: Darstellung der Magnetisierung M für das Spin- $\frac{1}{2}$ -Shastry-Sutherland-Modell ($J_1 = 1$) mittels des Reihen-Modellzustandes.

der Magnetisierung M sollte in dem hier betrachteten Bereich allerdings Null sein, auch wenn negative Werte von M als ein Fehlen von langreichweitiger Ordnung interpretiert werden können (vgl. hierzu Kap. 3). Für $J_2/J_1 > 2$ ist $|M|$ mit $|M| < 10^{-2}$ in der Näherungsstufe *LSUB6* sehr Nahe bei Null. Allerdings werden die Resultate für M bei $J_2/J_1 < 2$ sehr schlecht, da M mit Annäherung an den kritischen Punkt J_2^c/J_1 nach $-\infty$ divergiert. Hier soll angemerkt werden, dass es sich beim Ket-Grundzustand um einen exakten Eigenzustand des Systems handelt und beim Bra-Zustand nicht, erneut, weil beide Zustände zueinander nicht adjungiert sind. Der Bra-Zustand braucht deswegen insbesondere kein exakter Eigenzustand des Hamilton-Operators zu sein, selbst wenn der Ket-Zustand ein solcher ist. Somit kann das Bra-Gleichungssystem einen kritischen Punkt besitzen (wo die \tilde{a}_1 divergieren), ohne dass es ein Analogon im Ket-Gleichungssystem gibt. Da nach (6.5) die Magnetisierung nur eine Funktion von \tilde{a}_1 ist, divergiert diese auch am kritischen Punkt. Unterhalb des kritischen Punktes $J_2 < J_2^c$ stellt der Néel-Zustand den vorzuziehenden CCM-Modellzustand dar [29].

6.3 Der $J - J'$ -Antiferromagnet auf dem CAVO-Gitter

Nachdem im Abschnitt zuvor ein frustriertes Spinsystem mit Produktmodellzuständen unabhängiger Einzelspin-Operatoren untersucht wurde, soll nun in diesem Teil des Kapitels ein unfrustriertes Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagnet auf dem CAVO-Gitter

betrachtet werden. Das CAVO-Gitter ist zur theoretischen Beschreibung des magnetischen Materials CaV_4O_9 gedacht und in Abbildung 6.10 illustriert. Es besitzt ebenfalls innerhalb bestimmter Parameterregionen einen plakettenartigen, quadrumerisierten Grundzustand. Man erkennt, dass es im CAVO-Gitter zwei nichtäquivalente Nächste-

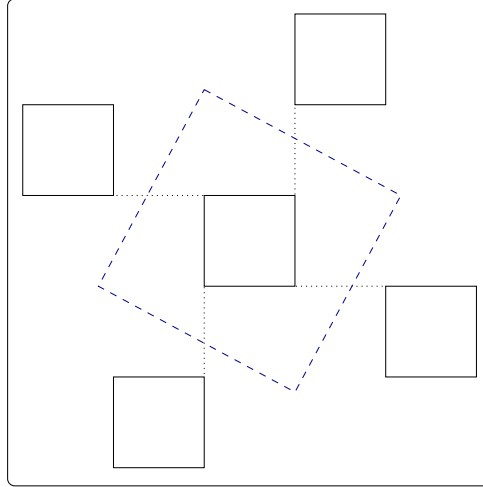


Abbildung 6.10: Darstellung des CAVO-Gitters. Die durchgezogenen Linien kennzeichnen die Nächsten-Nachbar-Bindungen J auf den Vier-Spin-Plaketten. Die punktierten Linien kennzeichnen die Nächste-Nachbar-Bindung J' zwischen den Spins auf zwei verschiedenen Plaketten. Die gestrichelte Linie kennzeichnet die vier Gitterplätze umfassende Elementarzelle.

Nachbar-Wechselwirkungen J und J' gibt. Dieses Modell ist zwar nicht frustriert, dennoch wird das Verhalten stark durch die Konkurrenz zwischen den beiden Bindungen bestimmt. Entscheidend ist das Verhältnis J'/J wobei für die folgenden Betrachtungen stets $J = 1$ angenommen wird. Verschiedene Untersuchungen [136, 148, 149, 150, 151, 152, 153] zeigen hierbei, dass es um $J'/J = 1$ eine Region $J'_{c_1}/J < J'/J < J'_{c_2}/J$ mit einem néelartig geordneten Grundzustand gibt. Die QMC-Ergebnisse [150, 150] für $J'_{c_1}/J \approx 0.939$ und für $J'_{c_2}/J \approx 1.68 \pm 0.14$ werden dabei als die genauesten in der Literatur zu findenden Werte für die Regionsgrenzen angesehen. Für $J'/J < J'_{c_1}/J$ befindet sich das System in einer quadrumerisierten VB-Phase mit ausgeprägten Spin-Korrelationen auf den Vier-Spin-Plaketten und für $J'_{c_2}/J < J'/J$ befindet sich das System in einer dimerisierten VB-Phase mit ausgeprägten Spin-Korrelationen auf den Dimeren zwischen den Vier-Spin-Plaketten. Hierbei bricht keine der beiden VB-Phasen die Translationssymmetrie des Gitters. Im Gegensatz zu den zuvor betrachteten Modellen (J_1 - J_2 -Kette, Shastry-Sutherland-Modell) gibt es hier jedoch für keinen Wert J'/J einen einfachen, exakten Produktgrundzustand. Weitere Details entnehme man den Referenzen [136, 148, 149, 150, 151, 152, 153].

Im Grenzfall $J'/J = 0$ sind alle Vier-Spin-Plaketten voneinander entkoppelt. Der Grundzustand für diesen Grenzfall ist ein Produktzustand solcher Vier-Spin-Singulets. Um mittels der CCM einen solchen Zustand zu beschreiben, soll als Ausgangszustand der Néel-Zustand mit antiparallelen Nächsten-Nachbar-Spins gewählt werden. Um einen geeigneten exakten VB-Produktzustand bei $J'/J = 0$ zu erhalten, müssen die Nächsten-Nachbar-Korrelationskoeffizienten a_1 (Spins liegen auf zwei benachbarten Vier-Spin-Plaketten, gekennzeichnet durch eine gepunktete Linie in Abbildung

6.10) und a_2 (Spins liegen benachbart auf einer Vier-Spin-Plakette, gekennzeichnet durch eine durchgezogene Linie in Abbildung 6.10) sowie der Korrelationskoeffizient für eine vollständige Vier-Spin-Plakette a_4^p (siehe Abbildung 6.10) passend gewählt werden. Man erhält nun den exakten VB-Produktgrundzustand durch die Wahl der Ket-Korrelationskoeffizienten $a_1 = a_4^p = 0.5$, während alle anderen Korrelationskoeffizienten Null gesetzt werden. Durch Vergrößerung des Verhältnisses auf Werte $J'/J > 0$, kann man, ausgehend von der exakten Lösung, mit diesem Startzustand Lösungen für Werte $J'/J > 0$ bestimmen. Auf diese Weise kann auch der dimerisierte VB-Zustand mit den Dimeren zwischen den Vier-Spin-Plaketten im Grenzwert $J'/J \rightarrow \infty$ bestimmt werden. In diesem Grenzfall ist $a_2 = 1$ und $\{a_L = 0 | \forall L : L \neq 1\}$. Die Ket-Korrelationskoeffizienten sind stellvertretend in der Näherungsstufe *LSUB8* in Abbildung 6.11 dargestellt. Die zu den hier diskutierten Ket-Korrelationskoeffizienten

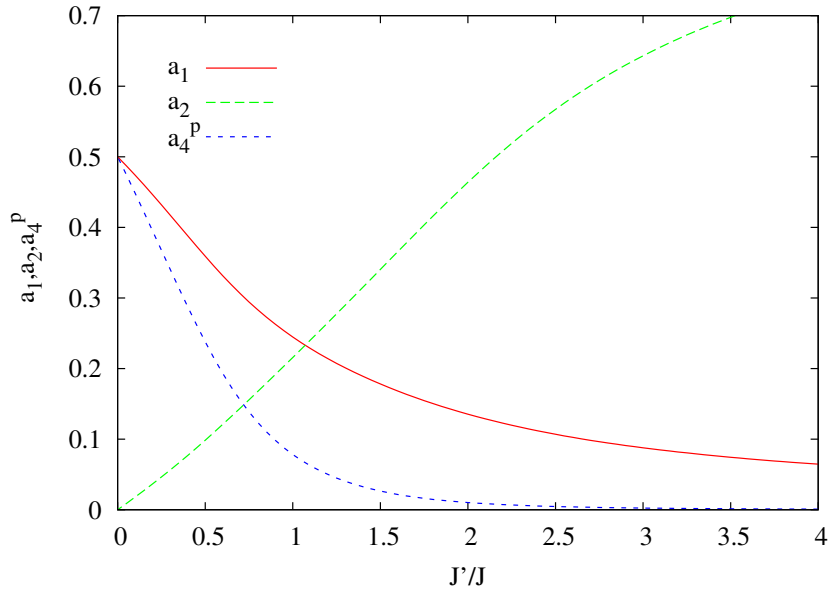


Abbildung 6.11: Darstellung der Ket-Korrelationskoeffizienten a_1, a_2 und a_4^p für den Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem CAVO-Gitter in der Näherungsstufe *LSUB8*.

korrespondierenden Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1, \tilde{a}_2 und \tilde{a}_4^p zeigen im Gegensatz zum zuvor untersuchten Shastry-Sutherland-Modell keine Diskontinuität und sind in Abbildung 6.12 dargestellt.

Die Grundzustandsenergie des CAVO-Gitters auf der Grundlage des hier gewählten Modellzustandes ist in Bild 6.13 dargestellt. Für $J'/J = 0$ wird in allen Näherungsstufen *LSUBn* mit $n \geq 4$ die exakte Grundzustandsenergie $E = -0.5$ wiedergegeben. Für $J'/J = 1$ findet man für die Grundzustandsenergie E das gleiche Resultat, das in [167] unter Verwendung des Néel-Zustandes als CCM-Modellzustand gefunden wurde. Die exakte Grundzustandsenergie im Grenzfall $J'/J \rightarrow \infty$ von $E = -0.375J'$ wird ebenfalls reproduziert. Insgesamt lässt sich also festhalten, dass die CCM für alle J'/J gute Werte für die Grundzustandsenergie E liefert.

Abbildung 6.14 zeigt die Magnetisierung M zusammen mit der Extrapolation $n \rightarrow \infty$ der *LSUBn*-Ergebnisse nach (2.61) unter Einbeziehung der *LSUBn*-Daten für $n = 4, 6, 8, 10$. In Abschnitt 2.3.8 wurde begründet, dass für ein System mit einem

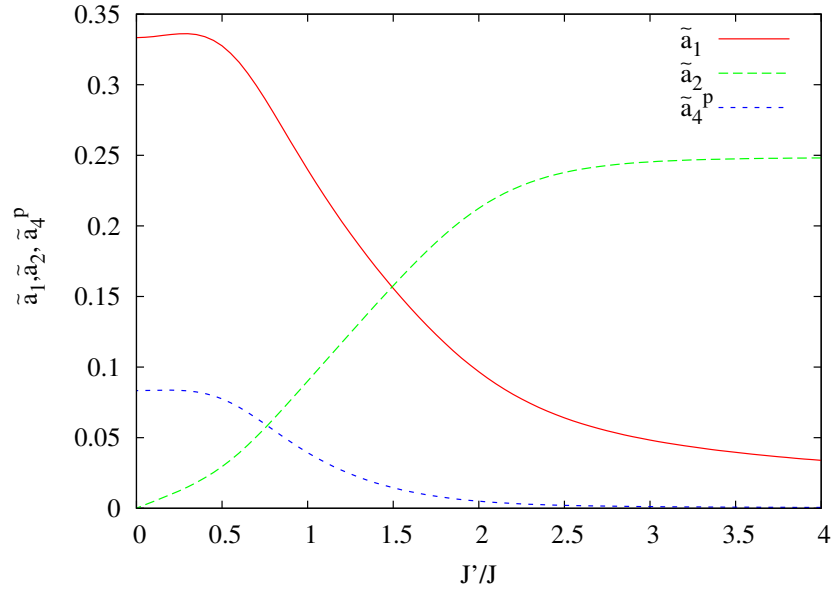


Abbildung 6.12: Darstellung der Bra-Korrelationskoeffizienten \tilde{a}_1 , \tilde{a}_2 und \tilde{a}_4^p für den Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem CAVO-Gitter in der Näherungsstufe *LSUB8*.

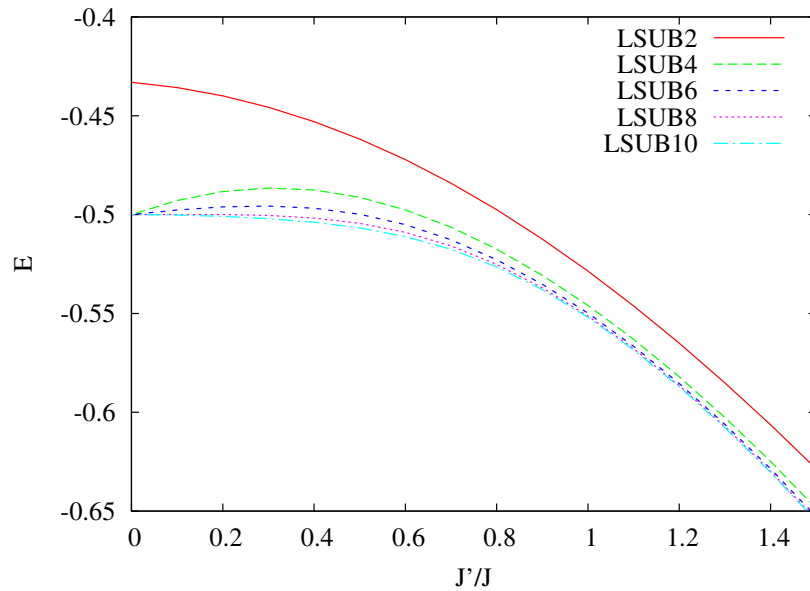


Abbildung 6.13: Darstellung der Grundzustandsenergie E für den Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem CAVO-Gitter.

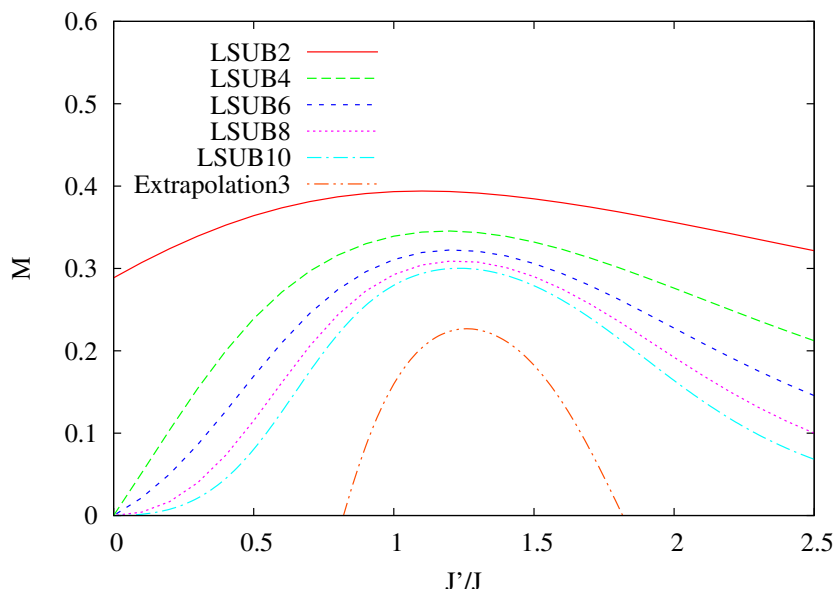


Abbildung 6.14: Darstellung der Magnetisierung M für den Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem CAVO-Gitter. Die Extrapolation wurde nach (2.61) ohne die *LSUB2*-Daten durchgeführt.

Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang eine Extrapolation auf der Grundlage eines Potenzgesetzes (2.61) geeignet ist, wie Untersuchungen in [94, 161, 162, 163, 164, 165] gezeigt haben. Auf diese Weise erhält man im Rahmen der CCM Werte für die kritischen Punkte J'_{c_1}/J und J'_{c_2}/J , bei denen die extrapolierten Werte der Magnetisierung Null sind. Diese kritischen Punkte sind (zusammen mit den entsprechenden Ergebnissen anderer Methoden) in Tabelle 6.2 dargestellt. Als Fazit der Untersuchungen in

Tabelle 6.2: Resultate für die kritischen Punkte J'_{c_1}/J und J'_{c_2}/J für den Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenberg-Antiferromagneten auf dem CAVO-Gitter.

Methode	J'_{c_1}/J	J'_{c_2}/J
CCM	0.82	1.82
QMC [149, 150]	0.939	1.68 ± 0.14
Reihenentwicklung [152]	0.9	1.7
Nichtlineare SWT [153]	0.90	1.6
Schwinger-Boson-Molekularfeld-Theorie [136]	0.6	2.4

diesem Kapitel lässt sich festhalten, dass mit dem vorhandenen CCM-Programmpaket unter Verwendung von passenden Produktzuständen von Einzelspin-Operatoren sowohl gewöhnliche néelartig geordnete Grundzustände als auch VB-Grundzustände beschrieben werden können. Damit erweitern sich auch die Anwendungsmöglichkeiten dieses numerischen Programmpaketes, ohne dass aufwändige prinzipielle Überarbeitungen des Programmcodes erforderlich sind.

Kapitel 7

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Dissertation wurde die Coupled-Cluster-Methode zur Untersuchung von unfrustrierten und frustrierten ein- und zweidimensionalen Quantenspinsystemen auf der Grundlage des Heisenberg-Modells untersucht. Im Vordergrund stand hierbei die Verwendung und Weiterentwicklung eines umfassenden numerischen Programmpaketes zur Berechnung hoher Näherungsstufen auf Multiprozessor-Computern. Zur Validierung der Ergebnisse nach der neuen Entwicklungsstufe des Programmcodes wurden in Kapitel 3 zunächst bereits vorhandene CCM-Resultate für den HAFM auf der linearen Kette und dem einfachen Quadratgitter reproduziert, um dann Berechnungen bis zu hohen, bisher nicht erreichbaren, $SUBn-n$ durchzuführen. Hierzu wurden einfache, isotrope Modellsysteme gewählt, dessen Verhalten z.T. exakt beschrieben werden kann. Für diese Systeme liegen ebenfalls Ergebnisse alternativer und etablierter Vielteilchen-Methoden vor. Tabellarisch wurden so *State-of-the-Art*-CCM-Resultate dargestellt, extrapoliert und kritisch diskutiert. Hierbei zeigte sich, dass die Genauigkeit der Ergebnisse der CCM mit den Ergebnissen der für die Untersuchung dieser Systeme genauesten Methoden wie der DMRG (1d-Systeme) und der QMC auf vergleichbarem Niveau liegen.

Im folgenden Kapitel 4 wurden ein quasi-eindimensionales frustriertes Heisenberg-Modell aus gekoppelten J_1 - J_2 -Ketten untersucht. Für solche Systeme kann die CCM durchaus als Methode der Wahl bezeichnet werden, da a priori nicht mit methodenspezifischen Limitierungen, verursacht durch die Dimension und durch Frustration, zu rechnen war. In diesem Kapitel wurden auch der Einfluss von Quantenfluktuationen, Frustration und der Zwischenkettenkopplung auf den Spiralwinkel und dem Phasenübergangspunkt zwischen einem Grundzustand mit kollinearen, kommensurablen Spin-Spin-Korrelationen zu einem Grundzustand mit spiralartigen, inkommensurablen Spin-Spin-Korrelationen untersucht. Hierzu wurde eine umfangreiche analytische Bestimmung des nichtlinearen Ket-Gleichungssystems in $SUB2-3$ dargestellt. Eine numerische Auswertung des Gleichungssystems zeigt für $J_2 > 0.25|J_1|$ ein signifikantes Abweichen des Quantenwinkels von seinem Wert im entsprechenden klassischen Modell und ist zudem stark durch die Zwischenkettenkopplung J_\perp beeinflussbar. Eine solche Beeinflussung durch eine Zwischenkettenkopplung wurde bisher nicht mit einer alternativen Methode untersucht. Auch eine Annäherung des Quantenwinkels an den Grenzwert $\frac{\pi}{2}$ erfolgt im Quantenmodell deutlich rascher. Für einige Kombinationen der Vorzeichen J_1 und J_\perp wurde zudem ein diskontinuierliches Verhalten des Spiralwinkels bestimmt, während jenes Verhalten im klassischen Modell grundsätzlich kontinuierlich ist.

Diese Untersuchungen profitierten in erheblichem Maße von der Möglichkeit, den Spiralwinkel als freien Parameter zu betrachten, der anschließend durch Minimierung der Grundzustandsenergie bestimmt wird.

In darauf folgenden Abschnitten des Kapitels 4, wurde der Übergang von einem ungeordneten eindimensionalen Grundzustand zu einem geordneten zweidimensionalen Grundzustand an zwei unfrustrierten Gittern untersucht. Beide Modellgitter unterscheiden sich hierbei in der Größe des Quantenspins s . Insbesondere wurde der vermutete Unterschied zwischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen und Spin-1-Systemen in Bezug auf die Frage nach der Existenz einer ungeordneten Phase diskutiert. Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen bis *LSUB10* für $s = \frac{1}{2}$ bzw. bis *SUB8-8* für $s = 1$ stützen die Vermutung, dass es im Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen keine ungeordnete Phase für $J_{\perp} \neq 0$ gibt, wohl aber im Spin-1-System, was mit der Existenz eines Spingaps für das 1d-Modell mit $s = 1$ im Zusammenhang steht. Obwohl für $s = 1$ die gewonnenen Werte für eine endliche kritische Kopplung sprechen, die für einen geordneten Grundzustand mindestens vorhanden sein muss, kann kein präziser Wert für diese kritische Kopplung angegeben werden. Bei Hinzunahme einer frustrierenden Übernächsten-Nachbar-Wechselwirkung zum hier betrachteten quasi-eindimensionalen Spin- $\frac{1}{2}$ -System, zeigte sich für stärkere Frustrationen ebenfalls die Notwendigkeit einer endlichen Zwischenkettenkopplung für einen ferngeordneten Grundzustand, was erneut mit dem sich durch die hinzukommende Frustration entstehenden Spingaps in Zusammenhang gebracht wurde. Insgesamt zeigten diese Untersuchungen, dass bei gaplosem eindimensionalen Grundzustand magnetische Fernordnung bei infinitesimaler Zwischenkettenkopplung auftritt, während es für einen eindimensionalen Grundzustand mit einem Spingap einer endlichen Zwischenkettenkopplung zur Herausbildung von Fernordnung bedarf.

Im Kapitel 5 wurde beschrieben, wie die CCM zur Untersuchung von Quantenspin-systemen in Anwesenheit eines äußeren magnetischen Feldes verwendet werden kann. Hierzu war erneut die Möglichkeit, den Spiralwinkel als freien Parameter zu betrachten, entscheidend für die Durchführbarkeit der Untersuchungen. Als Modellsysteme wurden das isotrope Quadratgitter und das isotrope Dreiecksgitter gewählt, von denen letzteres zudem noch stark frustriert ist. Für beide Modelle konnten genaue Werte für die Grundzustandsenergie, die Magnetisierung und für die Suszeptibilität ermittelt werden. Die Ergebnisse für das Quadratgitter stimmen hierbei gut mit den Ergebnissen alternativer Methoden wie der QMC, der ED und der SWT überein. Die Zahl methodischer Alternativen ist wegen der Frustration im Falle des Dreiecksgitters kleiner. Im Vergleich konnten mittels der CCM gute Werte für die angegebenen Größen, sowie für das $M/M_s = \frac{1}{3}$ -Plateau bestimmt werden. Bisher in der Literatur nicht zu finden waren hierbei, die Ergebnisse für die Magnetisierungen der einzelnen Untergitter, die Suszeptibilität in Abhängigkeit vom Feld und die entsprechenden Feldabhängigkeiten der Winkel.

Im Kapitel 6 wurde demonstriert, dass mit dem vorliegenden numerischen Programmpaket, ohne die Notwendigkeit der Implementierung einer komplett neuen Matrixalgebra für jeden neuen Modellzustand, dimer- und plakettenartige Valence-Bond-Grundzustände unter Verwendung von Produktmodellzuständen unabhängiger Einzelspin-Operatoren beschrieben werden können. Hierzu wurden die J_1 - J_2 -Kette, das Shastry-Sutherland-Modell und das CAVO-Modell (auf der Grundlage des Heisenberg-Modells) untersucht, welche jeweils in verschiedenen Regionen der Modellparameter lokale Dimere oder Plaketten ausbilden. Es wurde demonstriert, dass exakte lokale Singulett-Grundzustände gefunden werden können. Hierbei wurden insbesondere die Phasenüber-

gangsbereiche untersucht und die Ergebnisse mit denen auf der Grundlage des Néel-Modellzustandes verglichen. Ein Vergleich der CCM-Resultate mit Ergebnissen alternativer Methoden zeigt erneut gute Übereinstimmung. Ebenfalls wurde diskutiert, dass der Bra-Zustand ein hierzu abweichendes, eigenständiges Verhalten besitzen kann, was mit der fehlenden Adjungiertheit beider Zustände zusammenhängt. Diese fehlende Adjungiertheit hatte z.B. die Konsequenz, dass zwar die exakte Grundzustandsenergie (z.B. für das Shastry-Sutherland-Modell) gefunden werden konnte, die exakte Magnetisierung ($M = 0$) jedoch nicht. Während die Grundzustandsenergie nur vom Ket-Grundzustand abhängig ist, benötigt man für die Magnetisierung ebenfalls den Bra-Grundzustand, welcher hier eine eigenständige Verhaltensweise besitzt.

Als Fazit dieser Dissertation soll festgehalten werden, dass die CCM auf der Grundlage des numerischen Programmpaketes und der Auswertung hoher Näherungsstufen die Physik der hier untersuchten Systeme gut beschreibt. So konnte ein Beitrag zur Erweiterung des Wissens und des Verständnisses besonders der frustrierten Spinsysteme geleistet werden. Eine systematische Weiterentwicklung und Weiterverwendung des CCM-Programmpaketes lässt zukünftig auf weitere interessante physikalische Resultate hoffen.

Anhang A

Das numerische CCM-Programmpaket

In diesem Kapitel sollen einige Aspekte des für diese Arbeit verwendeten numerischen CCM-Programmpaketes [5] etwas detaillierter untersucht werden. Im Vordergrund stehen hierbei insbesondere die Berechnungsmöglichkeiten, die Programmstruktur, der Ressourcenverbrauch und das Skalierungsverhalten bei Multiprozessorsystemen. Alle in diesem Kapitel getroffenen Aussagen beziehen sich dabei selbstverständlich auf den Entwicklungsstand zum Zeitpunkt der Anfertigung dieser Dissertation (November 2009).

Im Kapitel 2 wurde die CCM als Vielteilchen-Methode allgemein beschrieben und in Abschnitt 2.3 wurde diese Methode für die Untersuchung von Spinsystemen, auf der Grundlage des Heisenberg-Modells, spezialisiert. Im Prinzip kann man die CCM nahezu rein analytisch verwenden, um Erwartungswerte an Quantenspinsystemen in niedrigsten Näherungsstufen zu berechnen¹. Mit Ausnahme von eindimensionalen Systemen wird man sich hierbei auf die Näherungsstufen *LSUB2* bzw. *SUB2 - 2* beschränken müssen, da die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen und damit die Größe der Gleichungssysteme rasch mit der Näherungsstufe ansteigen. Eine solche analytische Vorgehensweise wurde in Abschnitt 4.2.2 am Beispiel eines frustrierten quasi-eindimensionalen J_1 - J_2 -Modells vorgeführt.

Abgesehen von der Grundzustandsenergie und von unmittelbar aus dieser abgeleiteten Größen, sind die Genauigkeiten der analytisch gewonnenen Resultate im Vergleich zu exakten Ergebnissen bzw. zu den besten Ergebnissen anderer Vielteilchen-Methoden mehr oder weniger unpräzise. Das sehr systematische Approximationsschema und die analytische Vorgehensweise kann jedoch leicht auf beliebige Näherungsstufen übertragen und verallgemeinert werden, so dass sich hier die Verwendung von leistungsfähigen Computeralgorithmen geradezu anbietet. Mit einem solchen Programmpaket wurden in dieser Arbeit hohe CCM-Näherungsstufen berechnet. Zusammen mit einer passenden Extrapolation (Abschnitt 2.3.8) zählen die so ermittelten Resultate, im direkten Vergleich zu den Ergebnissen anderer Methoden, zu den besten verfügbaren Daten.

¹Hier soll angemerkt werden, dass man selbst bei analytischer Aufstellung der Gleichungssysteme ein numerisches Verfahren zu dessen Lösung verwenden wird (insbesondere für das nichtlineare Ket-Gleichungssystem). Ausnahmen bilden die sehr seltenen Fälle mit jeweils nur einer Gleichung.

A.1 Allgemeine Informationen und Berechnungsmöglichkeiten

Das Programmpaket *Crystallographic-Coupled-Cluster-Method* (in den folgenden Abschnitten CCCM genannt) ist ein in C++ geschriebenes Programm zur Berechnung von Grundzustandserwartungswerten (z.B. Grundzustandsenergie E und Untergittermagnetisierung M)² und des Energiegaps (Singulett-Triplett-Anregungslücke) für nahezu beliebige Quantenspinsysteme vom Heisenberg-Typ (auch XXZ-Modelle). Informationen über den aktuellen Entwicklungsstand und über die an der Entwicklung beteiligten Programmierer findet man in [168]. Eine englischsprachige Programmdokumentation (Bedienungshinweise) und Anleitungen zur Installation sind im Programmpaket [5] enthalten. Als Anwender des Programmpaketes muss man (im Wesentlichen) lediglich eine *Scriptdatei* anlegen, in welcher das betrachtete Modell auf vorgegebene Weise definiert wird. Die dort einzutragenden Größen beziehen sich auf die Modellparameter, die Näherungsstufe, das zugrundeliegende Bravais-Gitter des Modells, die Koordinaten der Gitterspins der Elementarzelle sowie der Koordinaten der durch eine direkte Bindung erreichten Nachbarn und der Festlegung der Bindungen entsprechend des Hamilton-Operators und des Modellzustandes. Eine ausführliche deutschsprachige Dokumentation, wo die gesamten Eingabeprozeduren an zahlreichen Beispielmolekülen demonstriert werden, findet man in [169]. Dem Programmpaket selbst liegen fertige *Scriptdateien* für viele bereits untersuchte Spinsysteme bei. In diesen Dateien findet man auch zahlreiche Vergleichsdaten zur Kontrolle.

A.2 Der Speicherverbrauch und das Skalierungsverhalten bei Multiprozessorsystemen

Bei Verwendung des numerischen CCCM-Programmpaketes ist es in vielen Fällen erforderlich, den zu erwartenden Ressourcenbedarf (Rechenzeit/Speicher) abzuschätzen bzw. Aussagen darüber zu treffen, wie sich der Ressourcenverbrauch mit zunehmender Näherungsstufe entwickelt. Solche Abschätzungen sind besonders für die Berechnung hoher Näherungsstufen erforderlich, um Anhaltspunkte für die Auswahl eines geeigneten Rechners zu haben. Darüber hinaus geben sie nützliche Einblicke in das Potenzial der CCM als Methode und helfen bei der Entscheidung, ob mit einer erfolgreichen Simulation gerechnet werden kann oder nicht. Hierzu wird in diesem Abschnitt zunächst der Ablauf einer Simulation an einer schematischen Darstellung vorgestellt. Die wesentlichen Programmabläufe können anhand dieser Darstellung erklärt und rechenzeit- sowie speicherintensive Teilschritte hervorgehoben werden. Diese schematische Darstellung des Ablaufes einer funktionstüchtigen Simulation zeigt Bild A.1. Als kurze Wiederholung sei hier noch einmal angegeben, dass innerhalb der CCM zu jedem Modellgitter, passend zum Modellzustand, fundamentale Konfigurationen ermittelt werden. Wie man diese allgemein bestimmt, wurde für den Grundzustand in Abschnitt 2.3.4 und für die ersten Anregungen im Abschnitt 2.3.7 ausführlich beschrieben. Diese erhält man aus sogenannten *lattice-animals* (im Folgenden auch als Gittertierchen bezeichnet) entsprechend der in den angegebenen Abschnitten beschriebenen Verfahrensweisen.

²Es können zusätzlich beliebige weitere Erwartungswerte berechnet werden, die jedoch, wie das Modell selbst, definiert werden müssen.

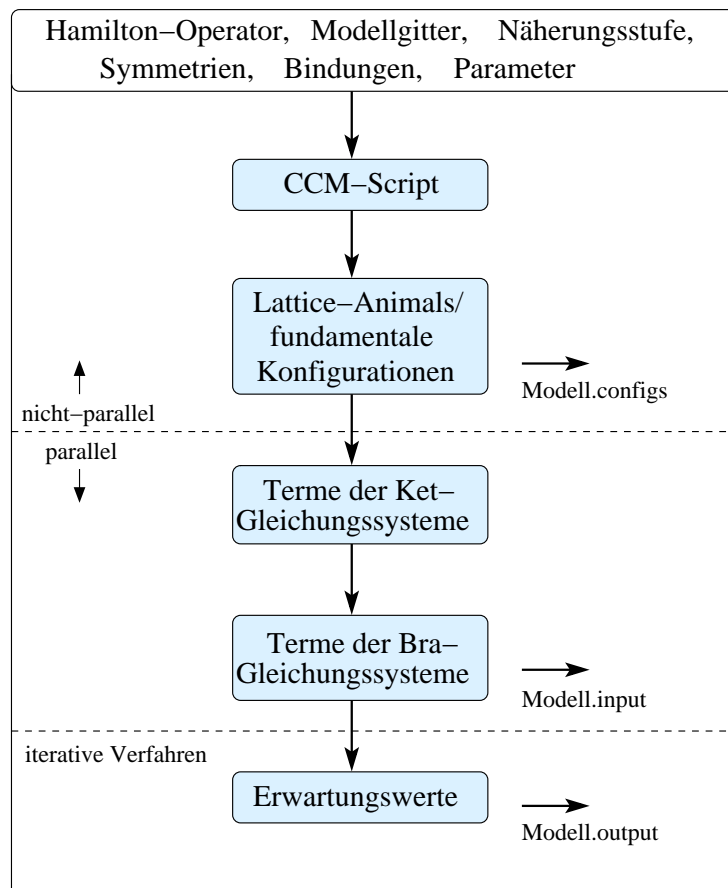


Abbildung A.1: Schematische Darstellung eines CCCM-Programmablaufes. Die Bestimmung der Gleichungssysteme (für den Grund- und Anregungszustand) kann auch nicht-parallel erfolgen.

Wie ebenfalls in Abschnitt 2.3.4 angegeben wurde, unterscheiden sich die Gittertierchen von den fundamentalen Konfigurationen dadurch, dass Symmetrieoperationen und Beschränkungen durch das Näherungsschema hinzukommen. Des Weiteren können fundamentale Konfigurationen, im Gegensatz zu den Gittertierchen, auch unverbunden sein. Trotz definitionsbedingter Unterschiede kann man viele Fragestellungen nach dem asymptotischen Verhalten der Gittertierchen unmittelbar auch auf die für die CCM relevanten, fundamentalen Konfigurationen übertragen. Im Allgemeinen werden die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen und die Anzahl der Gittertierchen stark voneinander abweichen. Die Größe dieser Abweichung ist insbesondere auch modellspezifisch.

Nachdem man für das zu untersuchende Spinsystem, entsprechend einer definierten Vorgabe, eine Script-Datei erstellt hat, ist die Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen der erste ressourcenintensive Arbeitsschritt nach dem Start der Simulation. Im vorliegenden CCCM-Programm wird dieser Schritt auch auf einem Multiprozessor-System nicht-parallel durchgeführt. Der implementierte Algorithmus könnte aber bezüglich seiner Effektivität durchaus weiter optimiert werden. Mit diesem Algorithmus können in vertretbarem Zeitaufwand, auf nahezu allen Standard-Computern für alle hier untersuchten Modelle, die fundamentalen Konfigurationen für genügend hohe Näherungsstufen bestimmt werden. Genügend hoch bedeutet in in diesem Zu-

sammenhang, dass weitere Programmschritte (Bestimmung der Gleichungssysteme) bei deutlich kleinerer Zahl an Konfigurationen zu einer Limitierung führen. So wurde beispielsweise die Zahl der fundamentalen Konfigurationen für den Grundzustand des $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitters in *LSUB14* bestimmt zu $N_f = 20922484$ (vgl. Tabelle 3.3). Eine CPU eines Intel(R) Core(TM)2 Duo E6750 mit 2.66GHz eines Standard-Arbeitsplatzrechners benötigte hierfür 14 Stunden und der Speicherbedarf (unkomprimiert) liegt bei etwa $0.55GB$. Mit den für diese Arbeit zur Verfügung stehenden Parallelrechnern konnte das zugehörige Gleichungssystem nicht ermittelt werden (Speicherproblem). Dennoch sollte auch der Arbeitsschritt der Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen parallelisiert werden, da es eine zunehmende Tendenz zur Verwendung massiver Parallelrechner gibt, welche zukünftig die zugehörigen großen Gleichungssysteme lösen können³.

Die Zahlen der fundamentalen Konfigurationen N_f (Grundzustand) bzw. N_f^ϵ (Anregungszustand) für ein spezielles Modell wachsen exponentiell mit größer werdender Näherungsstufe.

Für das asymptotische Verhalten der Anzahl an Gittertierchen bei zunehmender Clustergröße (als kombinatorisches Problem) gibt es jedoch, abgesehen von einigen Spezialfällen, keine allgemeingültigen und exakten Aussagen. In Abschnitt 2.3.4 wurde bereits angegeben, dass das asymptotische Verhalten solcher Gittertierchen Gegenstand aktueller Untersuchungen ist. Allerdings gibt es mittlerweile Verfahrensweisen, mit denen z.T. die Zahl der Gittertierchen für sehr große Cluster bestimmt werden kann (z.B. beim Quadratgitter bis zu $n = 56$ [22])⁴.

Im Kapitel 3 wurden vier einfache Modellsysteme untersucht und in entsprechenden Tabellen (3.1, 3.2, 3.3, 3.4) wurden neben physikalischen Größen auch Informationen zur Anzahl der fundamentalen Konfigurationen, zur Anzahl der Terme der Ket-Gleichungssysteme und zum Speicherverbrauch eingetragen.

A.2.1 Abschätzung der Anzahl fundamentaler Konfigurationen

Zur Abschätzung der Anzahl fundamentaler Konfigurationen, als eine für die numerische Rechnung wichtigen Kenngröße, bestimmt man Faktoren F_{N_f} (Grundzustand)

³In großen Parallelrechnern werden oftmals CPUs mit einer vergleichsweise moderaten Taktfrequenz verwendet, weil bei der gegenwärtigen Struktur der CPUs der Stromverbrauch und damit auch die abzuführende, von der CPU verursachte Wärmeentwicklung rasch ansteigt. Da hier nun das umfangreicher werdende Netzwerk ebenfalls hohen Einfluss auf die Systemperformance hat, ist eine niedrigere -weil angepasste- Taktfrequenz gängig. Es ist zu erwarten, dass deshalb künftig besonders der Grad der Parallelisierung dieser Rechner und nicht vorrangig nur die Geschwindigkeit einer einzelnen CPU zunehmen wird. Insgesamt kann also auch eine parallele Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen zukünftig sinnvoll sein, da die Möglichkeit besteht, nennenswert Zeit einzusparen. Grundsätzlich kann eine Parallelisierung dieses Arbeitsschritts dann auch die Gesamtperformance des CCCM-Programms verbessern. Existierende Programme zur parallelen Gittertierchen-Bestimmung zeigen, dass der zusätzliche (zu erwartende) Mehraufwand durch die Parallelisierung den Zeitgewinn nicht überkompensiert bzw. sich parallele Algorithmen als sehr effektiv erweisen [21]. Mit hoher Wahrscheinlichkeit überträgt sich dies auch auf die Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen.

⁴Hier ist allerdings noch zu beachten, dass es zwischen den Gittertierchen (aus z.B. [22]) und den Gittertierchen, die im CCCM-Programm die Grundlage für die fundamentalen Konfigurationen stellen, Unterschiede gibt. Diese Unterschiede stammen aus der Berücksichtigung des Bravais-Gitters im CCCM-Programm, das automatisch die Eigenschaften der Elementarzelle und die speziellen Translationssymmetrien der Modelle in die Gittertierchen-Bestimmung einbezieht.

und $F_{N_f^\epsilon}$ (Anregungszustand), mit denen man die Anzahl der Konfigurationen einer Näherungsstufe multiplizieren muss, um die entsprechende Anzahl der nächsthöheren Näherungsstufe zu erhalten. Für die in Kapitel 3 untersuchten Modellsysteme wurden diese Faktoren ermittelt und in der Abbildung A.2 graphisch dargestellt. Man

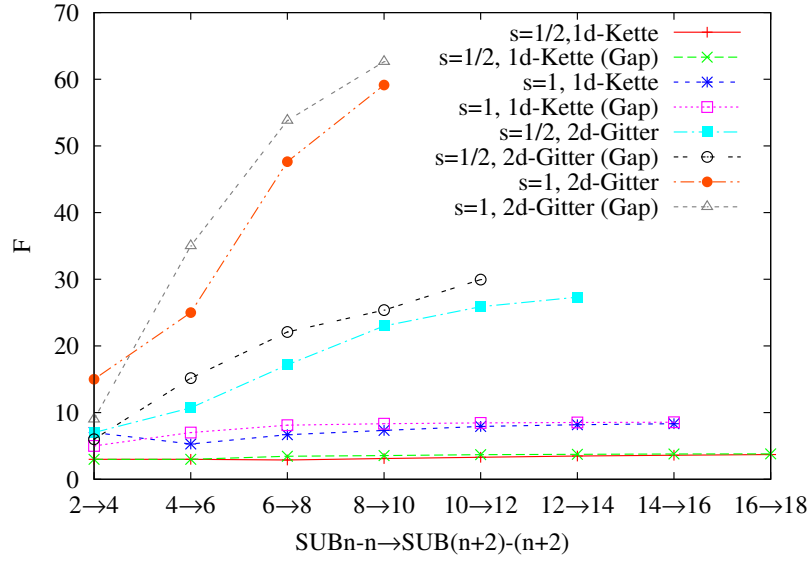


Abbildung A.2: Darstellung der Faktoren F_{N_f} und $F_{N_f^\epsilon}$ für die fundamentalen Konfigurationen der in Kapitel 3 untersuchten Modellsysteme. Man beachte, dass für die eindimensionalen Modelle mehr Datenpunkte zur Verfügung stehen.

erkennt in guter Näherung einen linearen Zuwachs der Faktoren für die fundamentalen Konfigurationen. Man kann nun eine (optimale) Gerade durch die Datenpunkte bestimmen und die Faktoren für höhere Näherungsstufen ablesen. Man erkennt in Abbildung A.2 auch, dass diese Art der Abschätzung für die beiden eindimensionalen Modelle etwas besser zu funktionieren scheint. Auf der Grundlage der N_f aus den Näherungsstufen $LSUB2$ - $LSUB16$ erhält man als Faktor zur näherungsweisen Bestimmung der N_f in $LSUB18$ für die Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette den Wert $F_{N_f} \approx 3.7$ und damit $N_f \approx 12439$. Dieser Wert stimmt sehr gut mit dem exakten Wert $N_f = 12445$ überein. Eine vergleichbare Überschlagsrechnung für z.B. die Anzahl der Konfigurationen des angeregten Zustandes des zweidimensionalen Spin- $\frac{1}{2}$ -Gitters liefert zur Abschätzung der $LSUB12$ -Konfigurationszahl aus der Konfigurationszahl N_f^ϵ in $LSUB10$ den Faktor $F_{N_f^\epsilon} \approx 28$ und damit als Schätzwert für $LSUB12$ den Wert $N_f^\epsilon \approx 1450000$. Auch dieser Wert stimmt gut mit dem exakten Wert $N_f^\epsilon = 1374389$ überein. Hier kann man zusammenfassend festhalten, dass der Zuwachs an fundamentalen Konfigurationen mit der Näherungsstufe gut abgeschätzt werden kann. Untersuchungen an komplizierteren Modellen, als die hier betrachteten Ketten und Quadratgitter, zeigen, dass diese Vorgehensweise der Abschätzung auf jeden Fall die richtige Größenordnung für die fundamentalen Konfigurationen liefert.

Interessant ist hierbei auch, dass man bei der $s = \frac{1}{2}$ -Kette mit zunehmender Näherungsstufe eine Annäherung an den Faktor $F_{N_f} = 4$ erkennt. Berücksichtigt man keine Symmetrien und keine weiteren Beschränkungen durch die Wahl des Modellzustandes (z.B. s_T^z -Erhaltung beim Néel-Zustand; vgl. Abschnitt 2.3.4), so ist bei der $s = \frac{1}{2}$ -Kette $F_{N_f} \equiv 4$. Bei Vergrößerung der Näherungsstufe $SUBn - n$ auf $SUB(n + 2) - (n + 2)$,

gibt es für das Anheften von zwei hinzukommenden Gitterplätzen an jede bestehende Konfiguration drei Möglichkeiten, womit sich die Anzahl insgesamt vervierfacht. Das Anstreben der Faktoren F_{N_f} an den Faktor $F_{N_f} \equiv 4$ zeigt, dass der Anteil an Konfigurationen, welche wegen der Symmetrien und Beschränkungen durch besondere Eigenschaften des Modellzustandes wegfallen, asymptotisch unbedeutend wird. Für die $s = 1$ -Kette ist ohne Symmetrien und Beschränkungen durch besondere Eigenschaften des Modellzustandes $F_{N_f} = 9$ (bei Vergrößerung der Näherungsstufe $SUBn - n$ auf $SUB(n+2) - (n+2)$), wie vergleichbare kombinatorische Betrachtungen bei Hinzunahme zweier Gitterplätze zeigen. Man muss hier lediglich noch berücksichtigen, dass für $s = 1$ bis zu zwei Spinflip-Operatoren auf einen Gitterplatz angewendet werden können und einen Beitrag liefern (vgl. Abschnitt 2.3.4). Man hat also für die Spinketten absolute Obergrenzen, mit denen die Zahl der fundamentalen Konfigurationen abgeschätzt werden kann.

Für die erste Auswahl eines geeigneten Computersystems zum Starten einer gewünschten Simulation sind diese Möglichkeiten des Abschätzens sehr hilfreich, da die Zahlen N_f bzw. N_f^c und die iterativ zu lösenden Gleichungssystemgrößen identisch sind.

Man beachte allerdings, dass die Entwicklung der Zahl der fundamentalen Konfigurationen (wie oben angegeben) ein offenes kombinatorisches Problem darstellt. Die hier getroffenen Aussagen helfen in realistischen CCCM-Simulationen und haben z.T. nicht den Anspruch, für beliebige n gültig zu sein.

Entsprechend Bild A.1 erfolgt nach der Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen der Arbeitsschritt der Bestimmung der Gleichungssysteme.

A.2.2 Abschätzung des Speicherbedarfes für die Speicherung der CCM-Gleichungssysteme

Für jede der zuvor bestimmten Konfigurationen wird eine Ket-Gleichung aufgestellt, die von den Korrelationskoeffizienten aller Konfigurationen abhängig ist. Mit den Reihen (2.32) bzw. (2.56) und den zugehörigen Wechselwirkungstermen (2.37) bzw. (2.58) sind die Terme der Ket-Gleichungssysteme für den Grund- und Anregungszustand nach Wahl der Näherungsstufe festgelegt. Oftmals ist die Bestimmung und Speicherung dieser Terme der rechenzeit- und speicherintensivste Teil einer CCCM-Simulation. Für diesen Arbeitsschritt kann (für hohe Näherungsstufen sollte) ein paralleler Algorithmus verwendet werden. In den Tabellen (3.1, 3.2, 3.3, 3.4) wurden auch die Anzahl der Terme der Ket-Gleichungssysteme und der reine, durch diese Terme verursachte Speicherverbrauch eingetragen.

Für eine überschlagsmäßige Abschätzung des Gesamtspeicherverbrauchs (minimaler Speicherverbrauch) ist die Anzahl der Terme der Gleichungssysteme entscheidend, wenn auch der tatsächliche Speicherverbrauch (bzw. der vom System benötigte Speicherbedarf) von zahlreichen weiteren Details abhängt und deutlich oberhalb der hier angegebenen Abschätzungen liegen kann. Jeder Term belegt hierbei *32Byte* Speicher. Analog zur Vorgehensweise bei der Abschätzung der Zahl der fundamentalen Konfigurationen, wurden hier ebenfalls zunächst versuchsweise Faktoren F_{N_T} und $F_{N_T^c}$ bestimmt, mit denen man die Anzahl der Terme einer Näherungsstufe multiplizieren muss, um die entsprechende Anzahl der nächsthöheren Näherungsstufe zu erhalten. Wie der Abbildung A.3 zu entnehmen ist, entwickeln sich die Faktoren F_{N_T} und $F_{N_T^c}$ der ein- und zweidimensionalen Gitter sehr unterschiedlich zueinander und auch innerhalb der zweidimensionalen Modelle gibt es Unterschiede. Die Abschätzung durch Annahme ei-

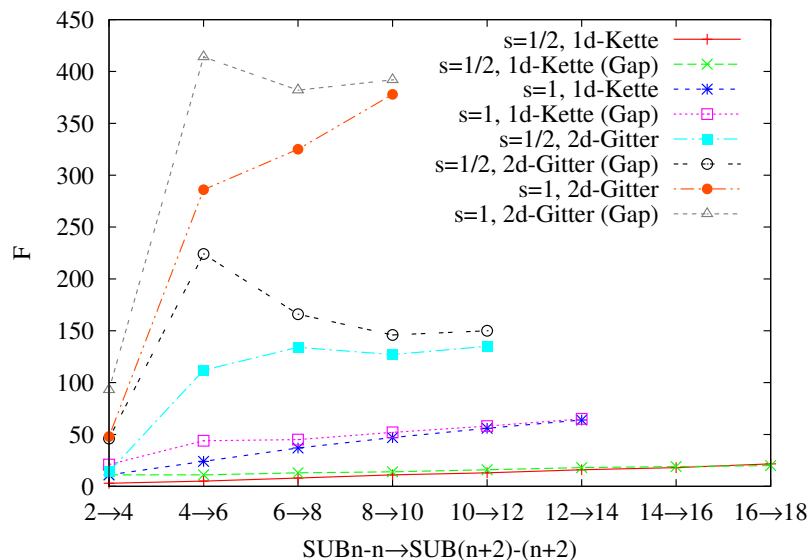


Abbildung A.3: Darstellung der Faktoren F_{N_T} und $F_{N_T^\xi}$ für die Terme der Ket-Gleichungssysteme der in Kapitel 3 untersuchten Modelle. Man beachte, dass für die eindimensionalen Modelle mehr Datenpunkte zur Verfügung stehen.

nes linearen Verlaufs ist nur für die eindimensionalen Modelle akzeptabel. Die in den Tabellen 3.1 und 3.2 eingetragenen Schätzwerte wurden deshalb auch auf diese Weise bestimmt und sind zuverlässig. Die zugehörigen Kurven der zweidimensionalen Gitter zeigen Änderungen in der Monotonie und verhalten sich ohne eine (offensichtliche) zuverlässige Tendenz. Auch zeigt sich hier der Nachteil, dass für die zweidimensionalen Modelle zum Auffinden einer Tendenz deutlich weniger Datenpunkte zur Verfügung stehen. Um dennoch auch für diese Modelle einen groben Richtwert zu bekommen, kann man als Faktor den jeweils letzten genauen Wert verwenden. Auf diese Weise wurden die in den Tabellen 3.3 und 3.4 eingetragenen Schätzwerte bestimmt.

Für das unterschiedliche Verhalten der ein- und zweidimensionalen Systeme, ist eine genauere Betrachtung der Zugehörigkeit der Terme zu den fundamentalen Konfigurationen interessant, was hier am Beispiel der $s = \frac{1}{2}$ -Systeme für den Grundzustand diskutiert werden soll.

Zunächst soll die Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette betrachtet werden. In $LSUBn$ gibt es für die eindimensionalen Systeme (unabhängig vom Spin s) nur eine Konfiguration, die eine Ausdehnung von n -Gitterplätzen besitzt. Diese Konfiguration besitzt zudem die größte Ausdehnung und die Zahl der zugehörigen Terme für die Ket-Gleichung zu dieser Konfiguration ist ebenfalls am größten. Die Anzahl der Terme (Ket-Gleichung) für die jeweils in einer Näherungsstufe größte Konfiguration wächst ebenfalls exponentiell mit zunehmender Näherungsstufe. Bildet man den Quotienten aus der Anzahl der Terme und der Anzahl der fundamentalen Konfigurationen N_T/N_f , so erhält man einen Durchschnittswert für die Termzahl je Konfiguration. Dividiert man diesen Durchschnittswert durch die Zahl der Terme der größten verbundenen Konfiguration, so strebt dieser Quotient gegen Null (siehe Tabelle A.1).

Der prozentuale Anteil der Terme zur größten Konfiguration, in Relation zur Gesamtzahl der Terme aller Konfigurationen, nimmt jedoch ab. Insgesamt bedeutet dies, dass der Arbeitsaufwand der Bestimmung der Terme zur größten Konfiguration dominant

Tabelle A.1: Übersicht über die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen N_f , der Termzahl des Grundzustands-Ket-Gleichungssystems N_T und der Termzahl der größten verbundenen Konfiguration N_T^* für die eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette für die einzelnen *LSUBn*. Die in Klammern angegebenen Werte der vorletzten Spalte geben den prozentualen Anteil (gerundet) der Terme der größten Konfiguration in Bezug zur Gesamtzahl der Terme an. In der letzten Spalte ist der Durchschnittswert der Terme je Konfiguration, dividiert durch die Termzahl der größten verbundenen Konfiguration, eingetragen.

Näherungsstufe	N_f	N_T	N_T^*	$N_T/(N_f \cdot N_T^*)$
<i>LSUB2</i>	1	7	4 (57.1%)	1.75
<i>LSUB4</i>	3	22	7 (31.8%)	1.05
<i>LSUB6</i>	9	131	29 (22.1%)	0.50
<i>LSUB8</i>	26	1149	180 (16.7%)	0.25
<i>LSUB10</i>	81	13147	1618 (12.3%)	0.10
<i>LSUB12</i>	267	181887	20705 (11.4%)	0.033
<i>LSUB14</i>	931	2943289	316143 (10.7%)	0.010
<i>LSUB16</i>	3362	53752098	5106390 (9.5%)	0.0031
<i>LSUB18</i>	12445	$\approx 1 \cdot 10^9$	≈ 80000000 ($\approx 8\%$)	≈ 0.0010

gegenüber allen anderen Konfigurationen ist und diese Dominanz mit wachsender Näherungsstufe zunimmt. Es bedeutet allerdings auch, dass die Gesamtheit aller anderen Konfigurationen mit wachsender Näherungsstufe dominant gegenüber der einzelnen größten Konfiguration ist. Anzumerken ist hier jedoch, dass auch einige unverbundene Konfigurationen mit einer Ausdehnung von n -Gitterplätzen eine zwar kleinere, jedoch größenordnungsmäßig vergleichbare Anzahl an Termen besitzen können.

Für die Durchführung einer konkreten CCCM-Simulation (an einem eindimensionalen System) ist es deshalb zweckmäßig, nicht nur den Speicherverbrauch aller Terme abzuschätzen, sondern auch den Speicherverbrauch der Terme der größten verbundenen Konfiguration allein. Betrachtet man hierzu als Beispiel die Anzahl der Terme der jeweils größten verbundenen Konfiguration für die Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette in den einzelnen *LSUBn* für $n \leq 16$, so findet man als Schätzwert für *LSUB18* den in der Tabelle A.1 angegebenen Wert. Es darf deshalb nicht verwundern, dass man hier nur unter großem Aufwand weitere Näherungsstufen berechnen kann, obwohl doch die totale Anzahl an Gleichungen selbst klein erscheint. Grund hierfür ist, dass in der vorliegenden Parallelisierung des CCCM-Programms, eine CPU die Aufgabe bekommt, alle Terme zu bestimmen, die zu den ihr zugewiesenen Konfigurationen gehören. Für das hier gewählte Beispiel müsste die CPU, die z.B. die verbundene *LSUB18*-Konfiguration zugewiesen bekommt, nur wegen der Terme dieser Grundzustandskonfiguration allein auf etwa $2.5GB^5$ Speicher zugreifen können.

Ein weiterer wichtiger Punkt in diesem Zusammenhang ist der Ressourcenbedarf (Rechenzeit und Speicher) bei der Bestimmung dieser Terme. Betrachtet man (2.38), so stellt man fest, dass die Terme der Ket-Gleichungen, unabhängig von der Anzahl der Spinflip-Operatoren, nur Produktterme von einem bis vier Korrelationskoeffizienten sind. Die Terme mit z.B vier Korrelationskoeffizienten innerhalb eines Produktes stam-

⁵Bei der Angabe des Speicherverbrauches wird der IEC-Empfehlung von 1996 gefolgt und die Zehnerpotenz verwendet, d.h. $1GB=10^9B$.

men von den Größen $4F_k F_m G_{km}$ und $F_k^2 F_m^2$ aus dem Ähnlichkeitstransformierten Term $\hat{s}_k^- \hat{s}_m^- |\Phi\rangle$. Die F_k bzw. F_m und G_{km} sind in den Gleichungen (2.32) definiert. Die Indizes der Summen in (2.32) laufen hierbei jeweils bis zum Wert n der maximalen Konfigurationsgröße. Die Produktterme aus diesen Summen bilden einen Teil der Terme der Ket-Gleichungen (die mit einem Produkt von vier Korrelationskoeffizienten). Diese tragen jedoch erst ab *LSUB6* bei und dienen hier stellvertretend als Betrachtungshilfe. Sie werden vom Algorithmus zunächst bestimmt, aber nur dann gespeichert, wenn sie prinzipiell auch beitragen. Anschließend werden diese Terme verglichen und falls möglich zusammengefasst. Die letztendlich zu speichernden Ausgabe-Terme stellen somit lediglich einen Bruchteil der zuvor untersuchten Eingabe-Terme dar. Kombinatorische Überlegungen zeigen nun, dass es hier für die größte verbundene Konfiguration ein Maximum an Möglichkeiten gibt, auch verglichen mit unverbundenen Konfigurationen der gleichen Ausdehnung, da diese mindestens zwei Erzeugungs-Operatoren weniger beinhalten. Demnach belastet auch dieser, sehr rechenzeitintensive Arbeitsschritt besonders die CPU, welche die größte verbundene Konfiguration zugewiesen bekommt. Für die Konfigurationen des angeregten Zustandes sind diese Aussagen etwas zu modifizieren, da es hier wegen der unterschiedlichen Auswahlkriterien keine verbundene Konfiguration mit genau n Gitterplätzen (in *LSUBn* mit geradem n , was hier ausschließlich eingestellt wurde) gibt. Es gibt nun jedoch zahlreiche unverbundene Konfigurationen mit $n - 1$ Gitterplätzen auf einem Gebiet der Ausdehnung n die eine hohe Anzahl an Termen verursachen. Die Anzahl der Terme für den angeregten Zustand (Tabelle 3.1) insgesamt ist hierbei in *LSUBn* noch höher als für den Grundzustand und damit auch der Speicherbedarf.

Obwohl in *LSUB20* für den $s = \frac{1}{2}$ -HAFM auf der linearen Kette nur 46764 (Grundzustand), bzw. 84106 (Anregungszustand) Gleichungen zu lösen sind, konnte, wegen der ungünstigen Verteilung des Arbeitsaufwandes auf die einzelnen CPU, eine Berechnung im Rahmen dieser Arbeit nicht erfolgen. Man beachte auch, dass für den $s = 1$ -HAFM auf dem isotropen Quadratgitter in *LSUB10* 1056286 (Grundzustand), bzw. 1061668 (Anregungszustand) Gleichungen erfolgreich gelöst werden konnten (für beide Modelle siehe auch Kapitel 3). Wie bereits weiter oben bei der Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen angegeben wurde, könnte man auch hier die Frage nach dem Nutzen einer anderen Aufteilung der Termbestimmung auf die einzelnen CPU stellen, um hierdurch den Aufwand optimaler auf das System zu verteilen. Ohne Zweifel würde man damit bei der Berechnung von Grundzustandserwartungswerten von eindimensionalen Systemen ein bis drei (je nach Modell) Näherungsstufen weiter kommen. Anders als beispielsweise die DMRG ist die CCM keine für eindimensionale Systeme prädestinierte Methode. Die CCM profitiert bei mehrdimensionalen (und besonders bei frustrierten) Systemen allerdings von den Schwächen der anderen Methoden (vgl. hierzu Abschnitt 2.2). Wie im Folgenden bei der Analyse der Ergebnisse zum Spin- $\frac{1}{2}$ -Quadratgitter gezeigt wird, gibt es jedoch in mehrdimensionalen Gittern keine dominante Konfiguration. Eine Modifikation des Programmcodes ist zwar möglich, bedarf allerdings einer zusätzlichen Motivation (Aufgabenstellung) und ist vermutlich nicht von generellem Interesse.

Betrachtet man nun die Konfigurationen des Spin- $\frac{1}{2}$ -Quadratgitters in *LSUBn* genauer, so findet man in *LSUB4* 4(7), in *LSUB6* 23(75), in *LSUB8* 229(1287) und in *LSUB10* 2600(29605) Konfigurationen mit n Gitterplätzen (in Klammern steht die Gesamtzahl der Konfigurationen in der gewählten Näherungsstufe). Die Anzahl an Konfigurationen mit n Gitterplätzen nimmt also exponentiell mit n zu. Das zweidi-

mensionale Gitter lässt hier mehr Kombinationsmöglichkeiten für die Anordnung der Spins in den Konfigurationen zu, weswegen zum einen N_f und N_T für die zweidimensionalen Systeme schneller wachsen und zum anderen die Verteilung der Terme auf die Konfigurationen anders als bei den eindimensionalen Systemen ist (es gibt keine einzelne dominante Konfiguration). Die Konfigurationen, welche zu Gleichungen mit sehr vielen Termen gehören, lassen sich besser auf die verwendeten CPUs aufteilen. Damit kann man für zweidimensionale Systeme demzufolge größere Gleichungssysteme lösen, erreicht aber nur kleinere Maximalnäherungsstufen.

A.2.3 Lösungsverfahren für die CCM-Gleichungssysteme

Nach Bild A.1 folgt auf dem Arbeitsschritt der Bestimmung der Gleichungssysteme der Arbeitsschritt der Lösung dieser Gleichungssysteme mittels eines geeigneten iterativen Verfahrens. Hierzu stehen gegenwärtig für den Grundzustand und für nicht-parallele Rechnungen das Newton-Raphson-Verfahren und für parallele/nicht-parallele Rechnungen die direkte Iteration zur Verfügung. Die zugehörigen Bra-Korrelationskoeffizienten werden nach (2.47) im nicht-parallelen Modus durch Lösen eines linearen (von den Ket-Korrelationskoeffizienten abhängigen) Gleichungssystems unter Verwendung der LU-Zerlegung bestimmt. Im parallelen Modus erfolgt auch die Lösung des Bra-Gleichungssystems mittels direkter Iteration.

Das Newton-Raphson-Verfahren gehört hierbei zu den bekanntesten und effizientesten Verfahren zur näherungsweise Nullstellenbestimmung nichtlinearer Gleichungen. Hat man als Ausgangswert eine hinreichend gute Näherung für die gesuchte Nullstelle, konvergiert dieses Verfahren meist sehr schnell und divergiert in nur wenigen Fällen. Die Zahl der tatsächlich benötigten Iterationsschritte (bei den hier gerechneten Modellen) liegen im Bereich 10^1 . Das Verfahren ist allerdings auch sehr speicherintensiv; allein für die Jakobi-Matrix benötigt man $8N_f^2$ Byte. Wegen der schnellen Konvergenz (aber der Tatsache, dass nur eine CPU verwendet werden kann) ist dieses Verfahren zumeist für kleinere Näherungsstufen optimal. Schätzt man den Speicheraufwand $\sim 8N_f^2 \text{ Byte}$ und den Rechenoperationsaufwand $\sim N_f^3$ ab, so benötigt man z.B. für $N_f = 100000$ etwa 80 GB Speicher und hat in der Dimension 10^{15} Rechenoperationen und für $N_f = 1000000$ etwa 8 TB Speicher und hat in der Dimension 10^{18} Rechenoperationen.

Bei der direkten Iteration sammelt man die linearen Anteile des Gleichungssystems für einen Koeffizienten auf einer Seite und die restlichen Terme auf der anderen Seite. Dann setzt man in der Seite mit den gemischten Termen einen Startwert ein und iteriert das System. Bei Verwendung des *mpi-codes* wird das Gesamtproblem entsprechend der verwendeten M -Prozessoren aufgeteilt. Jeder Prozessor stellt N_f/M Gleichungen von N_f Korrelationskoeffizienten auf und speichert diese unabhängig von den anderen Prozessen. Jeder Prozessor iteriert vom eingestellten Startwert aus sein Gleichungssystem. Nach jedem Iterationsschritt kommunizieren die Prozesse und tauschen für den nächsten Iterationsschritt ihre neuen Startwerte aus. Dieser Vorgang wird bis zur Konvergenz wiederholt. Diese Methode ist weniger speicherintensiv als das Newton-Raphson-Verfahren; der benötigte Speicher ist nur proportional zu N_f . Unter Verwendung des *mpi-Codes* erwies sich dieses doch recht simple Verfahren als recht erfolgreich zur Berechnung hoher Näherungsstufen. Das Verfahren konvergiert allerdings nur sehr langsam und verursacht einen beträchtlichen Kommunikationsaufwand auf Multiprozessorsystemen. Die Zahl der tatsächlich benötigten Iterationsschritte (bei den hier

gerechneten Modellen) liegen im Bereich von einigen 10^1 bis einigen 10^2 .

Die Eigenwertgleichungen für den angeregten Zustand nach (2.55) werden mittels der Potenzmethode gelöst [24]. Die Potenzmethode ist ein numerisches Verfahren zur Berechnung des betragsgrößten Eigenwertes λ_{max} (und des dazugehörigen Eigenvektors) einer Eigenwertgleichung $Ay = \lambda y$. Für die Bestimmung der ersten Anregung ist man allerdings an den betragskleinsten Eigenwert λ_{min} interessiert. Hierzu wird, nachdem λ_{max} bestimmt wurde, $(A - \lambda_{max}I)y' = \lambda'y'$ mittels direkter Iteration gelöst. Hierbei zeigte sich, dass diese Prozedur gegen einen Eigenwert $\lambda' = \lambda_{min} - \lambda_{max}$ konvergiert und der so bestimmte niedrigste Eigenwert gut mit dem niedrigsten Eigenwert, bestimmt mittels vollständiger Diagonalisierung dieser Matrizen, übereinstimmt. Die Potenzmethode ist hinsichtlich der Konvergenzgeschwindigkeit anderen bekannten Verfahren, wie dem Lanczos-Algorithmus, unterlegen. Bezüglich der Stabilität ist die Potenzmethode dagegen oft besser [170].

A.2.4 Eine einfache Performance-Untersuchung

Der gesamte Zeitanspruch der Lösung der Gleichungssysteme als letzten Arbeitsschritt einer CCM-Simulation richtet sich somit nach dem Lösungsverfahren, der Gleichungssystemgröße (Zahl und Speicher) und nach den zur Verfügung stehenden Rechnern. Eine pauschale Aussage kann hier selbstverständlich nicht getroffen werden.

Für eine konkrete physikalische Aufgabenstellung wird man in den meisten Fällen einen oder mehrere Parameter innerhalb bestimmter Intervalle variieren, um entsprechende Kurven darstellen zu können. Je nach Anzahl der erforderlichen Datenpunkte ist der Zeitaufwand, bezogen auf die gesamte Simulationszeit, selbstverständlich mehr oder weniger groß. Auch dieser Punkt wird bei der Auswahl eines geeigneten Rechners zu berücksichtigen sein. Somit setzt sich der Gesamtzeitverbrauch einer CCCM-Simulation aus der Zeit zur Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen, der Zeit zur Bestimmung der Gleichungssysteme und der Zeit zum Lösen dieser Gleichungssysteme zusammen. Diese Arbeitsschritte stellen zudem stark unterschiedliche Anforderungen an die verwendeten Computer. Bestimmte Arbeitsschritte sind parallel durchführbar, andere nicht, die Struktur der Gleichungssysteme (linear, nichtlinear) ist unterschiedlich und die Lösungsmethoden (Newton-Raphson-Verfahren, direkte Iteration, Potenzmethode) variieren mit der Aufgabenstellung.

Für die in Kapitel 3 untersuchten $s = \frac{1}{2}$ -Gitter soll deshalb hier eine kurze Performance-Analyse durchgeführt werden. Dabei wird hier nur die Zeit zur Bestimmung und Lösung der Gleichungssysteme auf zwei verschiedenen Multiprozessorsystemen angegeben⁶. Die optimale CPU-Zahl kann sowohl vom Rechner (CPU-Takt, kommunikative Fähigkeiten, Speicherzuordnung und Speichergöße), vom Modellsystem (Dimension, Kompliziertheit) als auch von der Gleichungssystemgröße abhängig sein. Für die größten bisher gerechneten Systeme (z.B. *LSUB12* für das Spin- $\frac{1}{2}$ -Quadratgitter) kann die Verwendung von bis zu einigen 10^3 -CPU optimal⁷ sein.

⁶Auf diffizile Zusammenhänge zwischen dem Skalierungsverhalten in Zusammenhang mit der Systemarchitektur und den einzelnen Einstellungen kann hier nicht eingegangen werden, da dies über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen würde. Insbesondere für konkrete Weiterentwicklungsansätze benötigt man eine differenziertere Analyse als die hier angegebenen Aussagen. Die hier getroffenen Aussagen sollen verdeutlichen, dass die Wahl eines geeigneten Rechners nicht ohne Analyse der Aufgabenstellung erfolgen sollte.

⁷Hierbei wird eine Situation als noch optimal verstanden, bei welcher eine Vergrößerung der CPU-Zahl noch einen erkennbaren zeitlichen Gewinn liefert.

Hier werden zwei sehr unterschiedliche Systemarchitekturen für die Analyse verwendet:

1. **Kautz: SiCortex SC5832**⁸: RAM: 3888 GB (4GB/Knoten, 3.6GB verfügbar), CPU: 972 x MIPS64 x 6 Cores, 700MHz.
2. **Marvel: HP GS1280**⁹: RAM: 128GB (Shared-Memory), CPU: 32 x Alpha EV7 (21364) 1150MHz.

Wie weiter oben diskutiert wurde, besitzt die Ket-Gleichung für die größte verbundene Konfiguration die meisten Terme und benötigt im Vergleich zu den jeweils anderen Gleichungen den meisten Speicher. Für eindimensionale Modelle erreicht man deshalb bei Clustercomputern schnell das Speicherlimit des einer CPU (oder des einem Knoten) zugeordneten Speichers, obwohl die totale Gleichungszahl vergleichsweise klein sein kann. Hier erweisen sich Shared-Memory-Systeme als vorteilhaft, da die CPU auf den ganzen Systemspeicher und nicht nur auf den zugeordneten Speicher zugreifen kann. (Insbesondere konnte *LSUB16* für $s = \frac{1}{2}$ -Kette nicht auf dem SiCortex berechnet werden, da trotz mehrere Terabyte RAM nicht genug Speicher pro Knoten zur Verfügung stand. Man erkennt hier erneut, dass es sinnvoll ist, den Ressourcenbedarf zur Bestimmung und Speicherung der Terme zur größten Konfiguration separat abzuschätzen.) Abbildung A.4 zeigt die Zeit zur Bestimmung t_{obtain} und zur Lösung t_{solve} (nur für den Grundzustand) der Gleichungen für die lineare $s = \frac{1}{2}$ -Kette in *LSUB14* in Abhängigkeit der CPU-Zahl. Die Zeit zur Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen ist nicht enthalten, da sie praktisch Null ist. Man erkennt bei beiden Systemen,

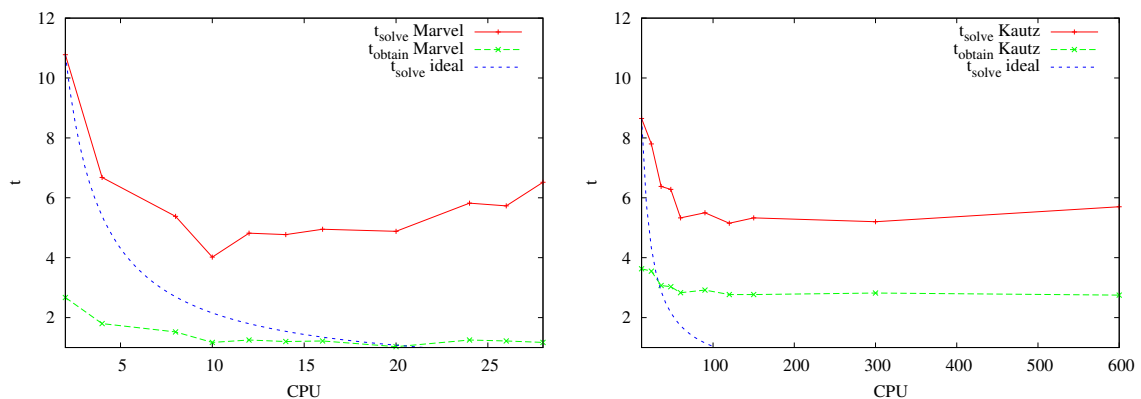


Abbildung A.4: Darstellung der Zeiten (in Minuten) zur Bestimmung t_{obtain} und zur Lösung t_{solve} des CCM-Gleichungssystems für eine Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette in *LSUB14* in Abhängigkeit von der verwendeten CPU-Zahl. Im linken Bild sind die Werte für den HP GS1280 (Marvel) und im rechten Bild für den SiCortex SC5832 (Kautz) eingetragen. Die ebenfalls eingezeichneten *idealen* Kurven geben, ausgehend vom ersten Wertepaar (CPU, t_{solve}), den idealen Verlauf (für die Zeit t_{solve}) an.

dass oberhalb der Grenze von wenigen CPU eine weitere Vergrößerung der CPU-Zahl keinen Gewinn bringt. Der HP GS1280 kann zudem gegenüber dem moderneren SiCortex SC5832 von seinen schnelleren CPU profitieren, was man an den Kurven zur

⁸Siehe <http://www-e.uni-magdeburg.de/urzs/kautz/>

⁹Siehe <http://www-e.uni-magdeburg.de/urzs/marvel/>

benötigten Zeit t_{obtain} erkennt. Für beide Rechner ist die Zeit t_{obtain} nach unten beschränkt. Diese Schranke entspricht der Zeit zur Bestimmung der Terme zur größten Konfiguration allein. Wegen der anderen Architektur des SiCortex SC5832 wirkt sich jedoch eine zu hoch gewählte CPU-Zahl im Gegensatz zum HP GS1280 nicht sehr nachteilig aus. Beim HP GS1280 ist, bezogen auf das untersuchte Modell, eine größere CPU-Zahl als 10 CPU unzweckmäßig¹⁰.

Für zweidimensionale Systeme ist das Skalierungsverhalten generell etwas besser, da es, wie weiter oben angegeben, keine einzelne dominante Konfiguration gibt. Die Terme zu den Konfigurationen (die Konfigurationen besitzen zusätzlich auf dem Gitter kleinere Ausdehnungen) lassen sich deshalb schneller bestimmen und auswerten. Der Rechen- und Speicheraufwand verteilt sich so gleichmäßiger auf die verwendeten CPU. Abbildung A.5 zeigt die Gesamtzeit t zur Bestimmung t_{obtain} und zur Lösung t_{solve} (nur für den Grundzustand) der Gleichungen für das isotrope $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter in *LSUB10* in Abhängigkeit von der CPU-Zahl. Für dieses System zeigt sich der Vorteil der ho-

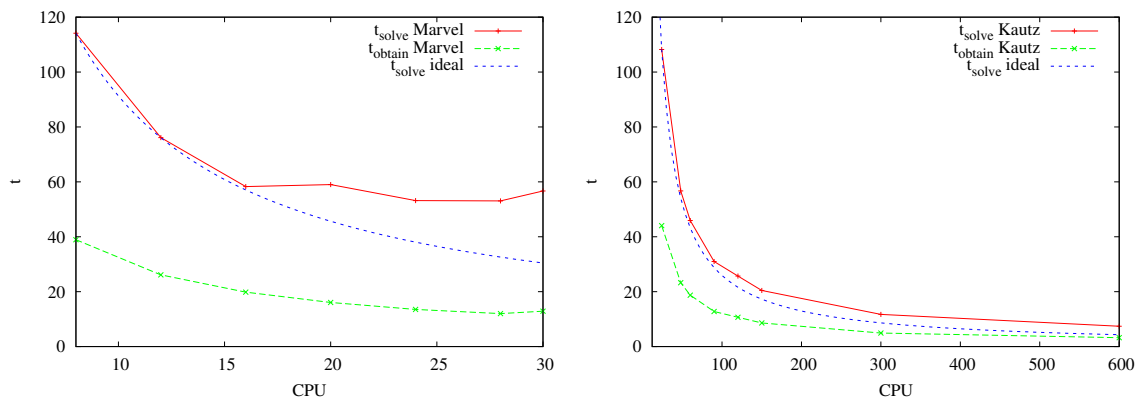


Abbildung A.5: Darstellung der Zeiten (in Minuten) zur Bestimmung t_{obtain} und zur Lösung t_{solve} des CCM-Gleichungssystems für ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Quadratgitter in *LSUB10* in Abhängigkeit von der verwendeten CPU-Zahl. Im linken Bild sind die Werte für den HP GS1280 (Marvel) und im rechten Bild für den SiCortex SC5832 (Kautz) eingetragen. Die ebenfalls eingezeichneten *idealen* Kurven geben, ausgehend vom ersten Wertepaar (CPU, t_{solve}), den idealen Verlauf (für die Zeit t_{solve}) an.

hen Parallelisierung des SiCortex SC5832, der offensichtlich für die Bearbeitung großer Systeme mit eher moderatem Speicher pro Knoten ausgelegt ist. (Insbesondere konnte *LSUB12* für das $s = \frac{1}{2}$ -Quadratgitter nicht auf dem HP GS1280 berechnet werden, da sowohl der Speicher als auch die Zahl der vorhandenen CPUs für diese Aufgabe zu klein sind.) Das Skalierungsverhalten weicht jedoch vom idealen Verlauf ab. Eine weitere Vergrößerung der CPU-Zahl brächte zwar noch einen zeitlichen Gewinn, jedoch ist dieser Gewinn in Anbetracht der Gesamtzeit unverhältnismäßig in Bezug auf die verwendete CPU-Zahl.

¹⁰Bei Shared-Memory Systemen ist die Kommunikation zwischen CPU und Speicher oft ein Grund für nicht-optimales Skalierungsverhalten bei Vergrößerung der CPU-Zahl. Ein Argument hierfür ist die notwendige Cachekohärenz, welche es bei einer Änderung der Informationen in einem Cache erfordert, dass diese Änderung in die anderen Caches gespiegelt wird (durch geeignete Cacheprotokolle), um das Wiedereinlesen von inkonsistenten Daten zu vermeiden. Hierunter kann die Performance des Systems leiden. Bei Clustercomputern kann dies nicht auftreten, weil die Prozesse voneinander isoliert ablaufen.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass bei der gegenwärtigen Aufteilung der Termbestimmung und Speicherung bei eindimensionalen Modellen Shared-Memory-Systeme mit großem Speicher und schnellen CPU unter Verwendung einer eher geringen Anzahl an verwendeten Prozessoren bereits geeignet sind, während massive Parallelrechner mit eher kleinem, CPU-gebundenem Speicher ihre Vorteile nicht immer ausspielen können. Bei höherdimensionalen Modellen wird die absolute erreichbare Näherungsstufe gegenüber den eindimensionalen Modellen kleiner bleiben. Grund hierfür ist zum einen die deutlich größere absolute Gleichungszahl in den einzelnen $LSUBn$ und zum anderen ist der Speicherverbrauch der größten verbundenen Konfiguration noch moderat, so dass sich hier große Parallelrechner eignen.

A.3 Numerische Schwierigkeiten und offene Problemstellungen

Bei allen Vorzügen, welche die CCM besitzt (hierzu siehe Abschnitt 2.2) können auch zahlreiche Probleme auftreten. In vielen Fällen konnten solche Probleme dadurch gelöst werden, dass man nach einem besseren physikalischen Verständnis für das Modell die CCM zweckmäßiger anwendete. Solche Anpassungen betreffen in den meisten Fällen die Wahl des Modellzustandes (besondere bei Systemen mit Phasenübergängen), die eingegebenen Startwerte (besonders in den Modellen, wo zusätzlich das Energieminimum in Abhängigkeit von einem oder mehrerer Winkel gesucht wird, z.B. Kapitel 4 bzw. Kapitel 5) oder eine geeignete Definition der Elementarzelle bzw. der Startwerte für die Koeffizienten (z.B. Kapitel 6 bei der Untersuchung mittels VB-Modellzustände). Schwierig sind jedoch Situationen, in denen die Iterationsverfahren zur Bestimmung der Lösungen der Gleichungssysteme trotz (scheinbar) physikalisch optimaler Vorgaben nicht, oder gegen unphysikalische Werte konvergieren. Oft zeigt sich hierbei auch, dass die erste nichttriviale Näherungsstufe (meistens $LSUB2$ oder $SUB2-2$, je nach Größe des Spins s) noch gerechnet werden kann (allerdings ist die Beschreibung der Physik des Systems in dieser Näherungsstufe noch sehr ungenau), es keinen Hinweis auf Probleme gibt und erst die Berechnung höherer Näherungsstufen versagt. Diese Situationen im Einzelnen zu analysieren bzw. hierfür Beispiele anzugeben und diese zu erörtern, würde den Rahmen dieser Dissertation sprengen. Hier soll deshalb eine Beschränkung auf allgemeine Hinweise genügen. Gibt es keine Gründe, die belegen, dass eine fehlende Konvergenz eine physikalische Eigenschaft des Modells ist, so sollte auch über die Verwendung eines anderen Modellzustandes nachgedacht werden. Treten bei einer konkreten Untersuchung Probleme dieser Art auf, so zeigt die Erfahrung, dass hierfür mit hoher Wahrscheinlichkeit subtile (und evtl. doch nicht bedachte) physikalische Eigenschaften des Modells verantwortlich sind. Dies ist deshalb so bemerkenswert, da z.T. große nichtlineare Gleichungssysteme gelöst werden müssen, deren Eigenschaften diesbezüglich nicht abgeschätzt werden können und man bei Problemen die Ursachen eher hier vermuten würde. Welligkeiten oder unphysikalische Monotonieänderungen können auch Artefakte der Näherung sein (siehe hierzu z.B. Kapitel 5) oder anzeigen, dass in dem System ein Phasenübergang zu einer Phase stattfindet, dessen Zustand keinen oder nur einen geringen Überlapp mit dem Modellzustand besitzt. Zukünftiges Weiterentwicklungspotential findet man in der Implementierung alternativer Iterationsverfahren, welche die Vorzüge der schnellen Konvergenz des Newton-Raphson-Verfahrens und die Vorzüge des geringen Speicherverbrauchs der direkten

Iteration in sich vereinen. Auch könnte man die Art der Parallelisierung bezüglich der Bestimmung und Zusammenfassung der Terme zu den größten Konfigurationen geeignet umgestalten. Hiervon würden allerdings nur CCCM-Simulationen von eindimensionalen Systemen nennenswert profitieren können. Wegen des exponentiellen Wachstums des Speicher- und Rechenzeitaufwandes kann das Ziel der Weiterentwicklungen nicht zwingend das Erreichen höherer Näherungsstufen sein. Ungenutztes Potential besteht in der Berechnung weiterer interessanter physikalische Größen, wie z.B. der Korrelationsfunktionen. Auch eine weitere Forschung bezüglich des Skalierungsverhaltens der Erwartungswerte mit $n \rightarrow \infty$ ist sinnvoll.

Literaturverzeichnis

- [1] Quantum Magnetism, eds. U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop, Lecture Notes in Physics **645** (Springer-Verlag, Berlin, 2004).
- [2] W. Heisenberg, Z. f. Phys. **49**, 619 (1928).
- [3] W. Nolting *Grundkurs theoretische Physik: 7. Viel-Teilchen-Theorie* Springer-Lehrbuch (2002).
- [4] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931); R.B. Griffiths, Phys. Rev **133**, A768 (1964); C.N. Yang and C.P. Yang, Phys Rev. **150**, 321 (1966).
- [5] For the numerical calculation we use the program package 'Crystallographic Coupled Cluster Method' of D.J.J. Farnell and J. Schulenburg, see <http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/ccm/index.html>.
- [6] F. Coester, *Nucl. Phys.* **7**, 421 (1958).
- [7] F. Coester and H. Kümmel, *Nucl. Phys.* **17**, 477 (1960).
- [8] R.F. Bishop, in *Microscopic Quantum Many-Body Theories and Their Applications*, eds. J. Navarro and A. Polls, Lecture Notes in Physics **510** (Springer-Verlag, Berlin, 1998), p. 1.
- [9] M. Roger and J.H. Hetherington, *Phys. Rev. B* **41**, 200 (1990), *ibid* Europhys. Lett. **11**, 255 (1990).
- [10] J. Arponen, *Ann. Phys. (N.Y.)* **151**, 311 (1983).
- [11] J. Rosenfeld, N.E. Ligterik and R.F. Bishop, *Phys. Rev. B* **60**, 4031 (1999).
- [12] W. Kutzelnigg, *Molec. Phys.* **94** 65 (1998).
- [13] Y. Xian *Phys. Rev. B* **66**, 184427 (2002).
- [14] Y. Xian, *Phys. Rev. B* **72**, 224438 (2005).
- [15] S. E. Krüger, Dissertation, Universität Magdeburg (2000).
- [16] W. Marshall, Proc. R. Soc. London, Ser. A **232**, 48 (1955).
- [17] M. Boninsegni, Phys. Rev. B **52** 15304 (1995).
- [18] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell and J.B. Parkinson, Phys. Rev. B **58** 6394 (1998).
- [19] R.F. Bishop, J.B. Parkinson, and Y. Xian, *Phys. Rev. B* **44**, 9425 (1991).

- [20] D. J. J. Farnell, R. F. Bishop and K. A. Gernoth, *J. Stat. Phys.* **108**, 401 (2002).
- [21] S. Mertens and M.E. Lautenbach, *Journ. Stat. Phys.* **66** 669 (1992).
- [22] <http://www.ms.unimelb.edu.au/iwan/animals/series/square.site.ser>
I. Jensen, in *Counting Polyominoes: A Parallel Implementation for Cluster Computing*, International Conference on Computational Science **2659** 203-212 (2003).
- [23] K. Emmrich *Nucl. Phys.* **A351**, 379 (1981).
- [24] D.J.J. Farnell, arXiv:0909.1226v2.
- [25] J. Richter, R. Darradi, R. Zinke, and R. F. Bishop, *Int. J. Modern Phys. B* **21**, 2273 (2007).
- [26] C. Zeng, D. J. J. Farnell and R. F. Bishop, *J. Stat. Phys.* **90**, 327 (1998).
- [27] R. F. Bishop, D. J. J. Farnell, S. E. Krüger, J. B. Parkinson, J. Richter, and C. Zeng, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, 6887 (2000).
- [28] S.E. Krüger, J. Richter, J. Schulenburg, D.J.J. Farnell, and R.F. Bishop, *Phys. Rev. B* **61**, 14607 (2000).
- [29] R. Darradi, J. Richter, and D. J. J. Farnell, *Phys. Rev. B* **72**, 104425 (2005).
- [30] D. Schmalfuß, R. Darradi, J. Richter, J. Schulenburg, and D. Ihle, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 157201 (2006).
- [31] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, J. Richter, preprint arXiv:0708.3555 (2007).
- [32] R. Zinke Diplomarbeit *Anwendung der Coupled-Cluster-Methode auf quasi-eindimensionale Quantenspinsysteme*, unpublished (2003).
- [33] R.F. Bishop, J.B. Parkinson and Y. Xian, *Phys Rev B* **46**, 880 (1992).
- [34] D.J.J. Farnell, R.F. Bishop and K.A. Gernoth, *Phys. Rev. B* **64**, 172409 (2001).
- [35] S.E. Krüger, R. Darradi, J. Richter, and D.J.J. Farnell, *Phys. Rev. B* **73**, 094404 (2006).
- [36] R. Darradi, J. Richter, and S.E. Krüger, *J. Phys.: Condens. Matter* **16** 2681 (2004).
- [37] S.E. Krüger, R. Darradi, J. Richter, and D.J.J. Farnell, *Phys Rev B* **73**, 094404 (2006).
- [38] H.-J. Mikeska and A. K. Kolezhuk, in *Quantum Magnetism*, eds. U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop, *Lecture Notes in Physics* **645** (Springer-Verlag, Berlin, 2004), p. 1.
- [39] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [40] A. Koga and N. Kavakami, *Phys. Rev. B* **61**, 6133 (2000).
- [41] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 964 (1952).

- [42] S.R. White and D.A. Huse, Phys. Rev. B. **48**, 3844 (1993).
- [43] J.P. Neirotti and M.J. de Oliveira, Phys. Rev. B. **53**, 668 (1996).
- [44] C.J. Hamer, Weihong Zheng and P. Arndt, Phys. Rev B **46**, 6276 (1992).
- [45] Weihong Zheng and C.J. Hamer Phys. Rev B **46**, 7961 (1993).
- [46] W. Zheng, J. Oitmaa and C.J. Hamer, Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991).
- [47] A.W. Sandvik, Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).
- [48] B. J. Gibson, R. K. Kremer, A. V. Prokofiev, W. Assmus, and G. J. McIntyre, Physica B: Condensed Matter, **350** E253 (2004).
- [49] T. Matsuda, A. Zheludev, A. Bush, M. Markinka, and A. Vasiliev Phys. Rev. Lett. **92**, 177201 (2004).
- [50] A. A. Gippius, E. N. Morozova, A. S. Moskvin, A. V. Zalessky, A. A. Bush, M. Baenitz, H. Rosner, and S.-L. Drechsler, Phys. Rev. B **70**, 020406(R) (2004).
- [51] M. Enderle, C. Mukherjee, B. Fak, R.K. Kremer, J.-M. Broto, H. Rosner, S.-L. Drechsler, J. Richter, J. Malek, A. Prokofiev, W. Assmus, S. Pujol, J.-L. Raggazoni, H. Rakato, M. Rheinstädter, and H.M. Ronnow, Europhys. Lett. **70**, 237 (2005).
- [52] T. Masuda, A. Zheludev, A. Bush, M. Markina, and A. Vasiliev, Phys. Rev. Lett. **92**, 177201 (2004); S.-L. Drechsler, J. Málek, J. Richter, A.S. Moskvin, A.A. Gippius, and H. Rosner, Phys. Rev. Lett. **94**, 039705 (2005).
- [53] S.-L. Drechsler, J. Richter, A.A. Gippius, A. Vasiliev, A.S. Moskvin, J. Málek, Y. Prots, W. Schnelle, and H. Rosner, Europhys. Lett. **73**, 83 (2006).
- [54] S.-L. Drechsler, J. Richter, R. Kuzian, J. Málek, N. Tristan, B. Büchner, A.S. Moskvin, A.A. Gippius, A. Vasiliev, O. Volkova, A. Prokofiev, H. Rakato, J.-M. Broto, W. Schnelle, M. Schmitt, A. Ormezi, C. Loison, and H. Rosner, J. Magn. Magn. Mater. **316**, 306 (2007).
- [55] S. Park, Y.J. Choi, C.L. Zhang, and S.-W. Cheong, Phys. Rev. Lett. **98**, 057601 (2007).
- [56] S.-L. Drechsler, O. Volkova, A.N. Vasiliev, N. Tristan, J. Richter, M. Schmitt, H. Rosner, J. Málek, R. Klingeler, A.A. Zvyagin, and B. Büchner, Phys. Rev. Lett. **98**, 077202 (2007).
- [57] Y. Tarui, Y. Kobayashi, and M. Sato, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 043703 (2008).
- [58] J. Málek, S.-L. Drechsler, U. Nitzsche, H. Rosner, and H. Eschrig, Phys. Rev. Lett. submitted (2008).
- [59] L. Capogna, M. Mayr, P. Horsch, M. Raichle, R. K. Kremer, M. Sofin, A. Maljuk, M. Jansen, and B. Keimer, Phys. Rev. B **71**, 140402(R) (2005).

- [60] V. V. Mazurenko, S. L. Skornyakov, A. V. Kozhevnikov, F. Mila, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **75**, 224408 (2007).
- [61] T. Hamada, J. Kane, S. Nakagawa, and Y. Natsume, *J.Phys.Soc.Jpn.* **57**, 1891 (1988); **58**, 3869 (1989).
- [62] R. Bursill, G.A. Gehring, D.J.J. Farnell, J.B.Parkinson, T. Xiang, and C. Zeng, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 8605 (1995).
- [63] V.Ya. Krivnov and A.A. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **53**, 6435 (1996).
- [64] S.R. White and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).
- [65] A.A. Aligia, C.D. Batista, and F.H.L. Eßler, *Phys. Rev. B* **62**, 3259 (2000).
- [66] D.V. Dmitriev, V.Ya. Krivnov, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **75**, 014424 (2007).
- [67] C.K. Majumdar and D.K. Gosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1388 (1969).
- [68] B.S. Shastry and B. Sutherland, *Physica B* **108**, 1069 (1981).
- [69] J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter and J. Schulenburg, *Eur. Phys. J. B* **24**, 475 (2001); J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167207 (2002); J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, and H.-J. Schmidt, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 779 (2004).
- [70] R. Zinke, S.-L. Drechsler, and J. Richter *Phys. Rev. B* **79**, 094425 (2009).
- [71] B. Normand, K. Penc, M. Albrecht, and F. Mila, *Phys. Rev B* **56**, R5736 (1997).
- [72] E. Manousakis, *Reviews of Modern Physics* **63**, 1 (1991).
- [73] J. Richter, J. Schulenburg, and A. Honecker, in *Quantum Magnetism*, eds. U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop, *Lecture Notes in Physics* **645** (Springer-Verlag, Berlin, 2004), p. 85.
- [74] M. D. Johannes, J. Richter, S.-L. Drechsler and H. Rosner, *Phys. Rev. B* **74**, 174435 (2006).
- [75] T. Sakai and M. Takahashi, *J. Phys. Jpn.* **58**, 3131 (1989).
- [76] A. Parola, S. Sorella and Q. F. Zhong, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4393 (1993).
- [77] D. Ihle, C. Schindelin, A. Weisse and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **60**, 9240 (1999).
- [78] A. H. Castro Neto and D. Hone, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2165 (1996).
- [79] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3069 (1999).
- [80] I. Affleck, M. G. Gelfand and R. P. Singh, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 7313 (1994).
- [81] Z. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 126 (1997).
- [82] Y. J. Kim and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **62**, 6378 (2000).

- [83] M. Matsumoto, S. Todo, C. Yasuda and H. Takayama, Phys. Rev. B **65**, 014407 (2001); preprint cond-mat/0310619.
- [84] F. Alet and E.S. Sorensen, Phys. Rev. B **65**, 092408 (2002).
- [85] Y. Q. Wang, G. S. Tian and H. Q. Lin, Phys. Rev. B **67**, 064408 (2003).
- [86] K. M. Kojima, Y. Fodamoto, M. Larkin, G. M. Luke, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, K. Yamada, Y. Endoh, S. Hosoya, B. J. Sternlieb and G. Shirane, Phys. Rev. Lett. **78**, 1787 (1996).
- [87] H. Rosner, E. Eschrig, R. Hayn, S.-L. Drechsler and J. Málek Phys. Rev. B **56**, 3402 (1997).
- [88] E. E. Kaul, H. Rosner, V. Yushankhai, J. Sichelschmidt, R. V. Shpanchenko and C. Geibel, Phys. Rev. B **67**, 174417 (2003).
- [89] M. Kenzelmann, A. Zheludev, S. Raymond, E. Ressouche, T. Masuda, P. Böni, K. Kakurai, I. Tzukada, K. Uchinokura, and R. Coldea, Phys. Rev. B **64**, 054422 (2001).
- [90] A. A. Belik, M. Azuma and M. Takano, J. Solid. State. Chem. **177**, 883 (2003).
- [91] J. P. Rennard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, C. Erkelens, J. Rossat-Mignod and W. G. Stirling, Europhys. Lett. **3**, 945 (1987).
- [92] E. Aydiner and C. Acyüz, cond-mat/0501111.
- [93] K. Nomura and K. Okamoto, Phys. Rev. Lett **169A**, 433 1993; K. Nomura and K. Okamoto, J. Phys. A.: Math. Gen. **27**, 5773 (1994).
- [94] R. Zinke, J. Schulenburg and J. Richter, Eur. Phys. J. B **64** 147-151 (2008).
- [95] J. Villain, R. Bidaux, J.P. Carton, R. Conte, J. Phys. **41**, 1263 (1980).
- [96] E.F. Shender, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **83**, 326 (1982).
- [97] C.L. Henley, Phys. Rev. Lett. **62**, 2056 (1989).
- [98] K. Kubo and T. Kishi, J. Phys. Soc. Jap. **60**, 567 (1990).
- [99] H.P. Bader and R. Schilling, Phys. pev. B **19**, 3556 (1979).
- [100] S.E. Krüger and J. Richter, Phys. Rev. B **64**, 024433 (2001).
- [101] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen, and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995).
- [102] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. A. Fisher, Science **303**, 1490 (2004); T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M.P.A. Fisher, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).
- [103] A. Honecker, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 4697 (1999).

- [104] D.C. Cabra, M.D. Grynberg, A. Honecker, and P. Pujol, in *Condensed Matter Theories* Vol. **16** eds. S. Hernández and J.W. Clark (New York: Nova Science Publishers 2001) p.17; arXiv:cond-mat/0010376v1.
- [105] C. Lhuillier and G. Misguich, in *High Magnetic Fields*, Lecture notes in physics **595** eds. C. Berthier, L.P. Lévy, and G. Martinez(Springer, Berlin, 2002), p. 161.
- [106] A. Honecker, J. Schulenburg, and J. Richter, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S749 (2004).
- [107] H. Nishimori and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Japan* **55**, 4448 (1986).
- [108] A.V. Chubukov and D.I. Golosov, *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 69 (1991).
- [109] J. Alicea, A.V. Chubukov, O.A. Starykh, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 137201 (2009).
- [110] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [111] J. Schulenburg and J. Richter, *Phys. Rev.* **65**, 054420 (2002).
- [112] T. Ono, H. Tanaka, H. Aruga Katori, F. Ishikawa, H. Mitamura, and T. Goto, *Phys. Rev. B* **67**, 104431 (2003).
- [113] D.C. Cabra, M.D. Grynberg, P.C.W. Holdsworth, A. Honecker, P. Pujol, J. Richter, D. Schmalfuß, and J. Schulenburg, *Phys. Rev. B* **71**, 144420 (2005).
- [114] R. Schnalle and J. Schnack, *Phys. Rev. B* **79**, 104419 (2009).
- [115] C. Schröder, H. Nojiri, J. Schnack, P. Hage, M. Luban, and P. Kögerler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 017205 (2005).
- [116] N.A. Fortune, S. T. Hannahs, Y. Yoshida, T.E. Sherline, T. Ono, H. Tanaka, and Y. Takano, arXiv:0812.2077v1.
- [117] H. Kawamura and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4530 (1985).
- [118] M.E. Zhitomirsky, A. Honecker, and O.A. Petrenko, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3269 (2000); M.E. Zhitomirsky, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 057204 (2002).
- [119] M. Moliner, D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, F. Stauffer, arXiv:0809.5249.
- [120] D.J.J. Farnell, R. Zinke, J. Richter and J. Schulenburg, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 406002 (2009).
- [121] R. Kubo, *Phys. Rev.* **87**, 568 (1952); T. Oguchi, *Phys. Rev.* **117**, 117 (1960).
- [122] K.J. Runge, *Phys. Rev. B* **45**, 12292 (1992).
- [123] Zheng Weihong, J. Oitmaa, and C. J. Hamer, *Phys. Rev. B* **43**, 8321 (1991).
- [124] C.J. Hamer, Zheng Weihong, and P. Arndt, *Phys. Rev. B* **46**, 6276 (1992).
- [125] M. Zhitomirsky and T. Nikuni, *Phys. Rev. B* **57**, 5013 (1998).
- [126] A. Lüscher and A.M. Läuchli, arxiv:0812.3420.

- [127] A.L. Chernyshev and M.E. Zhitomirsky, arxiv:0902.4455.
- [128] A. V. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 8891 (1994).
- [129] A.E. Trumper, L. Capriotti and S. Sorella, *Phys. Rev. B* **61**, 11529 (2000).
- [130] R. Darradi, O. Derzhko, R. Zinke, J. Schulenburg, S.E. Krüger, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **78**, 214415 (2008).
- [131] A. Zheludev, S. Maslov, G. Shirane, Y. Sasago, N. Koide, and K. Uchinokura, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4857 (1997).
- [132] C. Schröder, R. Prozorov, P. Kögerler, M. D. Vannette, X. Fang, M. Luban, A. Matsuo, k. Kindo, A. Müller, and A.M. Todea *Phys. Rev. B* **77**, 224409 (2008).
- [133] L. Engelhardt, C. Martin, R. Prozorov, M. Luban, G.A. Timco and R.E.P. Winpenny, *Phys. Rev. B* **79**, 014404 (2009).
- [134] <http://tina.nat.uni-magdeburg.de/>
- [135] T. Tonewaga, and L. Harada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 2153 (1987).
- [136] M. Albrecht and F. Mila, *Europhys. Lett.* **34**, 145 (1996).
- [137] W. Zheng, J. Oitmaa, and C.J. Hamer, *Phys. Rev. B* **65**, 014408 (2002).
- [138] A. Läuchli, S. Wessel, and M. Sigrüst, *Rev. B* **66**, 014401 (2002).
- [139] W. Zheng, C.J. Hamer, and J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **60**, 6608 (1999).
- [140] E. Müller-Hartmann, R.R.P. Singh, C. Knetter, and G.S. Uhrig, *Phys. Rev. Lett.* **84** 1808 (2000).
- [141] M. Al Haijii, N. Guihery, J.-P. Malrieu, and B. Bouquillon, *Eur. Phys. J. B* **41**, 11 (2004).
- [142] C.H. Chung, J.B. Marston, and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **64**, 134407 (2001).
- [143] S. Miyahara and K. Ueda, *J. Phys. Condens. Matter* **15**, R327 (2003).
- [144] S. Miyahara and K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3701 (1999).
- [145] H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N.V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C.P. Slichter, T. Goto, and Y. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
- [146] J. Richter, J. Schulenburg, A. Honnecker, and D. Schmalfuß, *Phys. Rev. B* **70**, 174454 (2004).
- [147] G. Misguich, and P. Sindzingre, *J. Phys. Condens. Matter* **19**, 145202 (2007).
- [148] K. Ueda, H. Kontani, M. Sigrüst and P.A. Lee *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1932 (1996).
- [149] M. Troyer, H. Kontani, and K. Ueda *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3822 (1996).

- [150] M. Troyer, M. Imada, and K. Ueda, J. Phys. Soc. Japan **66**, 2957 (1997).
- [151] M.P. Gelfand, Weihong Zheng, R. R. P. Singh, J. Oitmaa, and C.J. Hamer, Phys. Rev. Lett. **77**, 2794 (1996).
- [152] Weihong Zheng, M.P. Gelfand, R. R. P. Singh, J. Oitmaa, and C.J. Hamer, Phys. Rev. B **55**, 11377 (1997).
- [153] S.V. Meshkov and D. Foerster, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 7917 (1996).
- [154] R.R.P. Singh, M.P. Gelfand, and D.A. Huse, Phys. Rev. Lett. **61**,2484 (1988).
- [155] N.B. Ivanov, S.E. Krüger, and J. Richter, Phys. Rev. B **53**, 2633 (1996).
- [156] P. Tomczak and J. Richter, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, L461 (2001).
- [157] R. Darradi, J. Richter, and D.J.J. Farnell, J. Phys.: Condens. Matter **17**, 341 (2005).
- [158] S. Wenzel, L. Bogacz, and W. Janke, Phys. Rev. Lett. **101**, 127202 (2008).
- [159] Y. Xian, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 5965 (1994).
- [160] D.J.J. Farnell and J.B. Parkinson, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 5521 (1994).
- [161] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, and J.Richter, J. Phys.: Condens. Matt. **20** 255251 (2008).
- [162] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, J. Schulenburg, and J. Richter, Phys. Rev. B **78**, 054412 (2008).
- [163] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, and J. Richter, Europhys. Lett. **83**, 47004 (2008).
- [164] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, R. Darradi, J. Richter, and C.E. Campbell, J. Phys.: Condens. Matt. **20**, 415213 (2008).
- [165] R. Darradi, O. Derzhko, R. Zinke, J. Schulenburg, S.E. Krüger, and J. Richter, Phys. Rev. B **78**, 214415 (2008).
- [166] N.B. Ivanov, J. Richter, and D.J.J. Farnell, Phys. Rev. B **66**, 014421 (2002).
- [167] D.J.J. Farnell, J. Schulenberg, J. Richter, and K.A. Gernoth, Phys. Rev. B. **72** , 172408 (2005).
- [168] <http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/ccm/index.html>
- [169] R. Zinke, *CCCM-Dokumentation*, unveröffentlicht (2009).
- [170] H.R. Schwarz and N. Köckler, Numerische Mathematik, 5. Aufl., Teubner-Verlag (2004).

Lebenslauf

Ronald Zinke
Bahnhofstraße 7
39175 Biederitz

Persönliche Angaben

geboren am: 09.01.1977
geboren in: Staßfurt
Familienstand: ledig, ein Sohn
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulbildung

1983-1991: Polytechnische Oberschule "Martin-Schwantes" in Egeln
1991-1995: Gymnasium Egeln, Abschluss mit Abitur

Studium

1995-1996: Physikstudium an der "Otto-von-Guericke"-Universität Magdeburg
1996-1997: Grundwehrdienst
1997-2004: Physikstudium an der "Otto-von-Guericke"-Universität Magdeburg,
Abschluss als Diplom-Physiker

Berufliche Tätigkeit

seit 2005: wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik
in der Forschungsgruppe "Theorie der Kondensierten Materie II"
der "Otto-von-Guericke"-Universität Magdeburg (Prof. J. Richter)
Themen: frustrierte Quantenspinsysteme; Coupled-Cluster-Methode

Magdeburg, 29.03.2010