

Analytische Methoden zur Untersuchung von  
niederdimensionalen Quantenspinsystemen:  
Coupled-Cluster-Methode und Spinwellentheorie

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

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

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

von **Diplomphysiker Sven E. KRÜGER**

geboren am 15. März 1970  
in Potsdam

Gutachter: Prof. Dr. Johannes Richter  
Prof. Dr. Manfred Ristig  
Privatdozent Dr. Ulrich Schollwöck

Eingereicht am: 24.11.1999  
Verteidigung am: 11.05.2000

## Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Johannes Richter für die Betreuung dieser Dissertation. Er hat durch vielfältige Anregungen und ständige Diskussionsbereitschaft sehr viel zum Entstehen der Arbeit beigetragen.

Weiterhin möchte ich mich bei allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe „Theorie der Kondensierten Materie II“ für die gute und immer freundliche Arbeitsatmosphäre und die langen und interessanten Diskussionen bedanken und darüberhinaus bei J. Schulenburg für die Bereitstellung der Daten zur exakten Diagonalisierung.

Ich danke außerdem Prof. R.F. Bishop und Dr. D.J.J. Farnell aus Manchester, England für Anregungen und Diskussionen und für die Möglichkeit, einen Teil dieser Arbeit an der dortigen Universität durchzuführen.

Für die persönliche Unterstützung während der gesamten Zeit meines Studiums möchte ich mich vor allem bei meinen Eltern bedanken.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Das <math>J</math>-<math>J'</math>-Modell</b>	<b>7</b>
2.1	Definition und grundlegende Eigenschaften . . . . .	8
2.2	Der klassische Grundzustand . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Coupled-Cluster-Methode</b>	<b>14</b>
3.1	Vorstellung der Methode . . . . .	14
3.1.1	Theoretischer Formalismus der CCM . . . . .	15
3.1.2	Allgemeine Schritte beim Anwenden der CCM . . . . .	17
3.2	Der Grundzustand . . . . .	18
3.2.1	Der Modellzustand . . . . .	18
3.2.2	Approximationsschema – LSUB $n$ . . . . .	21
3.2.3	Der Ket-Grundzustand . . . . .	24
3.2.4	Der Bra-Grundzustand . . . . .	27
3.3	Der angeregte Zustand . . . . .	30
3.4	Extrapolation der CCM-LSUB $n$ -Resultate . . . . .	32
3.5	Wahl des CCM-Modellzustandes . . . . .	33
3.6	Test der Methode am XY-Modell . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Spinwellentheorie und andere Methoden</b>	<b>41</b>
4.1	Lineare Spinwellentheorie . . . . .	41
4.2	Spinwellentheorie in höheren Ordnungen für die Néelphase . . . . .	48
4.2.1	Spinwellentheorie 1.Ordnung . . . . .	49
4.2.2	Renormierte Spinwellentheorie . . . . .	53
4.2.3	Renormierte Spinwellentheorie 2. Ordnung . . . . .	55
4.3	Dimerisierte Spinwellentheorie . . . . .	58
4.4	Einfache Variationsrechnung . . . . .	61

4.5	Exakte Diagonalisierung . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Resultate und Vergleich</b>	<b>64</b>
5.1	$J' > 0$ – Bildung von lokalen Singulets . . . . .	64
5.1.1	Phasenübergang zur dimerisierten Phase . . . . .	64
5.1.2	Energie und Magnetisierung im Grundzustand . . . . .	70
5.2	$J' = 0$ – Honigwaben-Gitter . . . . .	74
5.3	$J' < 0$ – Frustration . . . . .	74
5.3.1	Grundzustandsenergie . . . . .	75
5.3.2	Phasenübergang zur helixartigen Phase . . . . .	75
5.3.3	Magnetischer Ordnungsparameter . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>80</b>
<b>A</b>	<b>Zur CCM für Spinsysteme</b>	<b>82</b>
A.1	Algorithmus zum Erzeugen der fundamentalen Konfigurationen . . . . .	82
A.2	Algorithmus zum Erzeugen der Ket-Zustandsgleichungen . . . . .	85
A.3	SUB2-Näherung mit Néel-Modellzustand . . . . .	88
<b>B</b>	<b>Grundzustand quadratischer bosonischer Systeme mittels CCM</b>	<b>91</b>
<b>C</b>	<b>Normalordnen der Dyson-Maleev-Wechselwirkungsterme</b>	<b>95</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

In vielen Gebieten der modernen Physik spielen quantenmechanische Vielteilchensysteme eine wichtige Rolle. Da diese Systeme praktisch nie exakt gelöst werden können, kommt den Näherungsmethoden (Quanten-Vielteilchenmethoden), mit denen sie behandelt werden, eine große Bedeutung zu. Eine gute Methode soll dabei nicht nur in der Lage sein, die *makroskopischen* Eigenschaften des Systems allein durch die zugrundeliegenden *mikroskopischen* Wechselwirkungen herzuleiten, sondern sie soll auch möglichst universell anwendbar sein. Diese Kriterien erfüllen nur überraschend wenige Methoden,<sup>1</sup> es sind dies hauptsächlich Methoden der exakten Diagonalisierung, Quanten-Monte-Carlo-Methoden, die Methode der Störungsrechnung, die Methode der Green-Funktionen, variationelle Methoden, die Correlated-Basis-Function-Methode, die Configuration-Interaction-Methode und die Coupled-Cluster-Methode (CCM). Die CCM, mit der sich diese Arbeit beschäftigt, gilt als eine der besten von ihnen.

Die Vielteilchensysteme, die in der vorliegende Arbeit untersucht werden, sind Spin-1/2-Quantenspinsysteme, deren Wechselwirkung nach dem Heisenberg-Modell [2] erfolgt. Das Heisenberg-Modell gilt seit über 70 Jahren als ein Paradigma für Quantenvielteilchensysteme. Bei diesem Modell wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen auf die quantenmechanische Austauschwechselwirkung ( $J_{ij}$ ) beschränkt, die Elektronen sind lokalisiert und der Gesamtspin der Elektronen an einem Platz ist  $s = 1/2$ . Die Wechselwirkung läßt sich durch ein Produkt von Spinvektoren (kurz Spins genannt) darstellen,

$$J_{ij}\mathbf{s}_i\mathbf{s}_j = J_{ij}(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + s_i^z s_j^z),$$

wobei die Komponenten  $s^x$ ,  $s^y$  und  $s^z$  der Spins der quantenmechanischen Drehimpulsalgebra mit dem Drehimpuls  $s$  (hier  $s = 1/2$ ) gehorchen, sie vertauschen also nicht miteinander, wodurch es im System zu Quantenfluktuationen<sup>2</sup> kommt. Man spricht deshalb auch von *Quantenspinsystemen* (zur Unterscheidung von klassischen

---

<sup>1</sup>Für einen Überblick über einige dieser Methoden mit weiteren Referenzen siehe [1] und dort vor allem [37].

<sup>2</sup>Damit sind Abweichungen vom klassischen Grund- oder angeregten Zustand aufgrund der Quantennatur der Spins gemeint.

Spinsystemen, bei denen die  $\mathbf{s}_i$  klassische Vektoren sind). Das Heisenberg-Modell ist ein einfaches Modell mit einer isotropen Wechselwirkung zwischen den Spins des Gitters. Es ist als Modell zur Beschreibung magnetischer Phänomene geeignet, und wird zur Untersuchung der Eigenschaften von Ferro- und Antiferromagneten verwendet.

Obwohl das Heisenberg-Modell recht einfach ist, sind nur wenige exakte Resultate für Systeme mit kurzreichweitiger Wechselwirkung im thermodynamischen Limes bekannt. Exakte Lösungen beschränken sich größtenteils auf die eindimensionale Kette mit gleicher Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, die mit dem Bethe-Ansatz [3] behandelt werden kann. Ein anderes wichtiges exaktes Resultat ist das Mermin-Wagner-Theorem [6]. Danach zerstören thermische Fluktuationen (bei  $T > 0$ ) die magnetische Fernordnung für alle ein- und zweidimensionalen Heisenberg-Systeme. Weiter gibt es exakte Resultate für einige Systeme mit langreichweitiger Wechselwirkung, beispielsweise für Lieb-Mattis-Systeme [4] (mit konstanter langreichweitiger Wechselwirkung), welche eine interessante Physik haben können (s. z.B. [5]).

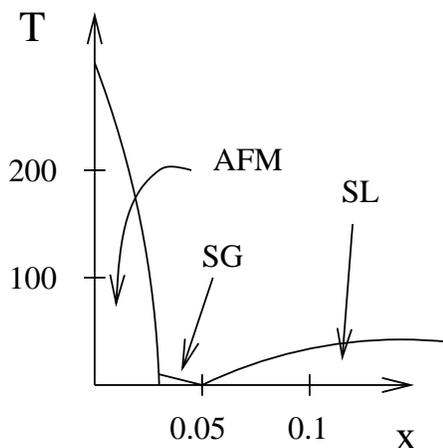


Abbildung 1.1: Qualitativer Verlauf des Phasendiagramms von  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , d.h. von mit Strontium dotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [9]. Es gibt unter anderem eine antiferromagnetische (AFM), eine ungeordnete (wahrscheinlich) spinglasartige (SG) (es könnte auch eine Quantenspinflüssigkeit sein) und eine supraleitende Phase (SL).

Das Interesse der Forschung an Quantenspinsystemen entstand in den letzten Jahren vor allem im Zusammenhang mit den Untersuchungen zum Mechanismus der Hoch-Temperatur-Supraleitung in den Kupraten. Das betrifft insbesondere die Frage nach der magnetischen Ordnung in ein- und zweidimensionalen Systemen. Nach einem Vorschlag von Anderson [7] könnte der Mechanismus für diese Supraleitung in der starken Korrelation der Elektronen in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen der neuentdeckten Materialien zu suchen sein.

Aufgrund bestimmter Eigenschaften dieser Materialien scheidet möglicherweise die BCS-Theorie [8] zur Erklärung aus. Wie z.B. das Phasendiagramm von dotiertem  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  zeigt (s. Abb. 1.1), existiert neben der supraleitenden Phase auch eine antiferromagnetische und eine ungeordnete, spinglasartige Phase, beide sind Isola-

toren. Überlegungen zur Elektronenstruktur und phänomenologische Betrachtungen zeigen, daß undotiertes  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  recht gut durch einen isotropen zweidimensionalen Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagnet auf einem quadratischen Gitter mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung beschrieben werden kann.<sup>3</sup> Durch Dotierung mit Strontium entstehen Löcher auf den O-Plätzen in den  $\text{CuO}_2$ -Ebenen, welche einer modifizierten Wechselwirkung zwischen den Cu-Plätzen entsprechen, die sich beispielsweise durch Einführung von frustrierender Wechselwirkung zwischen den Spins simulieren läßt.

Neben der Motivation im Zusammenhang mit der Hoch-Temperatur-Supraleitung stimulieren auch viele neue Materialien mit Quantenspincharakter (z.B.  $\text{CuGeO}_3$ ,  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_2)_3$ ,  $\text{CaV}_4\text{O}_9$ ) [11, 12, 24] die Forschung. So ist  $\text{CaV}_4\text{O}_9$  eines der ersten *zweidimensionalen* Systeme, bei dem ein Spingap<sup>4</sup> beobachtet wurde. Außerdem sind niederdimensionale Quantenspinsysteme als Beispiele von stark wechselwirkenden Quantenvielteilchensystemen auch von grundsätzlichem Interesse. Insbesondere ist die Rolle der Quantenfluktuationen auf die magnetische Fernordnung dieser Systeme nicht sehr gut verstanden. Man weiß aber, daß antiferromagnetisch gekoppelte zweidimensionale Systeme eher zu langreichweitiger Ordnung im Grundzustand neigen, wohingegen eindimensionale Quantenantiferromagnete im Grundzustand ungeordnet sind.

Quantenspinsysteme sind als Vielteilchensysteme in der Regel (insbesondere in zwei und höheren Dimensionen) einer exakten Behandlung nicht zugänglich. Aus diesem Grund sind Aussagen über die Güte der verwendeten Näherungsmethoden bei der Beschreibung der verschiedenen physikalischen Prozesse, die in diesen Systemen auftreten, sehr wichtig.

Im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit steht deshalb die Anwendung und der kritische Vergleich von analytischen Näherungsmethoden für Quantenspinsysteme. Dabei stehen als universelle Vielteilchenmethode die CCM und als spezielle (auf Quantenspinsysteme zugeschnittene und für diese etablierte) Methode die Spinwellentheorie im Vordergrund. Die Resultate werden mit den Ergebnissen der numerischen Methode der exakten Diagonalisierung verglichen.

Diese Methoden werden dazu auf ein Heisenberg-Spinmodell auf dem quadratischen Gitter angewendet, das in verschiedenen Parameterregionen zwei wichtige Mechanismen für die Zerstörung langreichweitiger Néel-artiger Ordnung in Quantenspinsystemen enthält – die Frustration<sup>5</sup> und die lokale Singulett-Formierung. Die Formierung von Singulettts ist ein rein quantenmechanischer Prozess, der einen Phasenübergang zweiter Ordnung zu einem ungeordneten Zustand verursacht; klassisch gibt es hier keinen vergleichbaren Phasenübergang. Frustration führt klassisch zu einem Phasenübergang vom Néelzustand zu einem anders geordneten Zustand, z.B. mit einer

---

<sup>3</sup>Dieses Modell wurde mit verschiedenen analytischen und numerischen Methoden untersucht (s. Übersichtsartikel in [10]).

<sup>4</sup>Damit bezeichnet man eine Lücke zwischen der Energie des Grundzustandes und der Energie der niedrigsten Anregung.

<sup>5</sup>Unter Frustration wird im folgenden ein Zustand verstanden, bei dem nicht alle Bindungen des Systems gleichzeitig befriedigt werden können, d.h. nicht in allen Spinpaaren können sich die Spins entsprechend der Bindung zwischen ihnen parallel (ferromagnetische Bindung) bzw. antiparallel (antiferrom. Bind.) ausrichten (Beispiele in Abb. 1.2). Es ist eine klassische Eigenschaft.

komplizierten nichtcollinearen Ordnung. Hier ist es denkbar, daß sich durch Quantenfluktuationen die Ordnung des Phasenüberganges ändert. Auch eine Verschiebung des Übergangspunktes kann stattfinden.

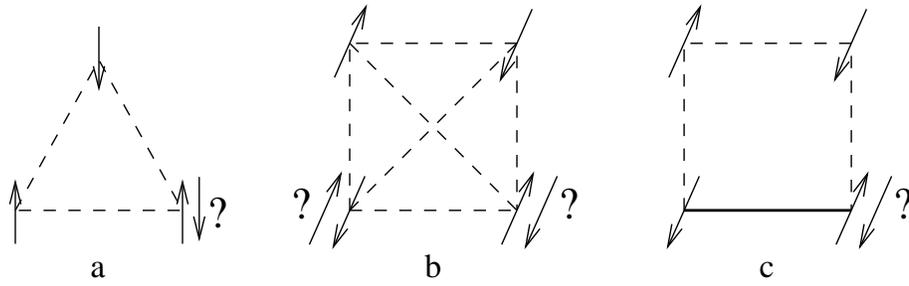


Abbildung 1.2: Auftreten von Frustration (gestrichelte Linien bedeuten anti-ferromagnetische Wechselwirkung, die durchgezogene Linie ferromagnetische) durch: (a) Gitterstruktur; (b) diagonale Bindungen (zwischen übernächsten Nachbarn); (c) unterschiedliche Bindungen zwischen nächsten Nachbarn. Auf den mit einem Fragezeichen gekennzeichneten Plätzen können die Spins keinen energetisch eindeutig optimierten (befriedigten) Zustand einnehmen.

Die CCM ist für Quantenspinsysteme noch eine recht neue, gleichwohl sehr vielversprechende Methode. Ihre Qualität soll insbesondere in Bereichen getestet werden, die mit anderen Standardmethoden schwierig zu behandeln sind. So verhindert z.B. das Vorzeichenproblem die Anwendung der Quanten-Monte-Carlo-Methode auf frustrierte Systeme, nichtcollineare Ordnung erschwert die Benutzung der exakten Diagonalisierung endlicher Systeme wegen stärkerer *finite-size*-Effekte in solchen Systemen.

Das in dieser Arbeit untersuchte Modell hat sehr interessante physikalische Eigenschaften (vor allem Phasenübergänge), die mit den verwendeten Methoden analysiert werden. Das Hauptziel der Untersuchung ist jedoch ein kritischer Vergleich der verwendeten Näherungsmethoden. Da die physikalischen Prozesse in dem Modell auch für viele andere Systeme typisch sind, haben die Ergebnisse des Vergleichs auch eine über das zu untersuchende Modell hinausgehende Bedeutung.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert:

In Kapitel 2 wird das Modell definiert und durch Beschreibung seiner Physik motiviert. Ferner wird der klassische Grundzustand untersucht.

In Kapitel 3 wird ausführlich die Anwendung der CCM auf das Modell beschrieben. Im 4. Kapitel wird die Anwendung weiterer Methoden (in erster Linie Spinwellentheorie) auf das Modell behandelt.

Das 5. Kapitel beschreibt die Ergebnisse mit den verschiedenen Methoden und die daraus folgende Physik des Modells. Die Resultate der Näherungsmethoden werden kritisch verglichen, und es werden Aussagen über die Brauchbarkeit der Methoden zur Beschreibung der verschiedenen physikalischen Prozesse gemacht.

Kapitel 6 faßt die Arbeit mit ihren wichtigsten Resultaten zusammen.

# Kapitel 2

## Das $J$ – $J'$ -Modell

Auf die Bedeutung von Quantenspinsystemen auf dem quadratischen Gitter wurde u.a. im Zusammenhang mit Hochtemperatursupraleitung und neueren Materialien bereits in der Einleitung (Kapitel 1) hingewiesen. Aufgrund von Untersuchungen mit verschiedenen Näherungsmethoden gilt es heutzutage als gesichert, daß der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem quadratischen Gitter mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung magnetisch ferngeordnet ist [10].

Ein weiteres Interessengebiet neuerer Forschung ist der  $J_1$ – $J_2$ -Antiferromagnet auf dem quadratischen Gitter, bei dem es neben der nächsten-Nachbar-Wechselwirkung ( $J_1$ ) auch eine frustrierende diagonale  $J_2$ -Bindung gibt (s. auch Abb. 1.2b). Dort bewirkt das Zusammenwirken der Frustration und der Quantenfluktuationen einen Phasenübergang zweiter Ordnung zwischen der Néelordnung und einer ungeordneten Quantenspinflüssigkeit (s. z.B. [13, 14, 15] und Referenzen darin). Auf der anderen Seite gibt es Fälle, in denen Frustration einen Phasenübergang erster Ordnung in Quantenspinsystemen verursacht, obwohl es einen Phasenübergang zweiter Ordnung im korrespondierenden klassischen Modell gibt [16, 17, 18, 19].

Neben der Frustration gibt es einen anderen Mechanismus, der die Zerstörung der Néelordnung im Grundzustand des unfrustrierten Heisenberg-Antiferromagneten bewirken kann, nämlich die Formation von lokalen Singulett-Paaren zweier gekoppelter Spins. Dieser Mechanismus wird auch Dimerisierung genannt. Er könnte für den quantenmechanisch ungeordneten Zustand von Systemen mit zwei Schichten [20, 21, 22, 23] und von  $\text{CaV}_4\text{O}_9$  (s. [24, 25, 26] und Referenzen darin) relevant sein. Die Formierung von lokalen Singulett-Paaren ist mit einer Energielücke (gap) im Anregungsspektrum verbunden. Im Gegensatz dazu ist die Öffnung eines Gaps im Anregungsspektrum frustrierter Systeme weniger gut verstanden.

In diesem Kapitel wird nun ein Heisenberg-Spinmodell auf dem quadratischen Gitter vorgestellt, welches beide Mechanismen, also Frustration und Singulett-Formierung, in verschiedenen Parameterregionen enthält. Im Abschnitt 2.1 wird es definiert und durch Beschreibung seiner grundlegenden Eigenschaften noch weiter motiviert. Der Abschnitt 2.2 ist dann dem klassischen Grundzustand des Modells gewidmet. Auf dieses Modell werden in den weiteren Kapiteln der Arbeit die verschie-

denen Näherungsmethoden angewendet, wobei ein kritischer Vergleich der Methoden im Vordergrund steht.

## 2.1 Definition und grundlegende Eigenschaften

Es wird ein Spin-1/2-Heisenberg-Modell auf einem quadratischen Gitter betrachtet, bei dem es zwei Wechselwirkungen,  $J$  und  $J'$ , zwischen nächsten Nachbarn gibt. Die verschiedenen Wechselwirkungen sind regelmäßig in einem Zickzack-Muster angeordnet (s. Abb. 2.1). Der Hamiltonoperator dieses, im folgenden als  $J$ - $J'$ -Modell bezeichneten Systems, ist durch die Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \sum_{\langle ij \rangle_1} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + J' \sum_{\langle ij \rangle_2} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \\ &\stackrel{J=1}{=} \sum_{i \in A} \sum_p (1 + \delta_{p,p'}(J' - 1)) \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+p} \end{aligned} \quad (2.1)$$

gegeben. Die Summationen über  $\langle ij \rangle_1$  und  $\langle ij \rangle_2$  kennzeichnen die Summationen über die nächsten-Nachbar-Bindungen, die in Abb. 2.1 durch gestrichelte, bzw. durchgezogene Linien dargestellt sind. In der gesamten Arbeit wird die  $J$ -Bindung als anti-ferromagnetisch ( $J > 0$ ) angenommen, und fortan auf den Wert  $J = 1$  festgesetzt. Der einzige freie Parameter des Modells ist dann  $J'$ , welcher alle Werte ( $-\infty \leq J' \leq \infty$ ) annehmen kann.

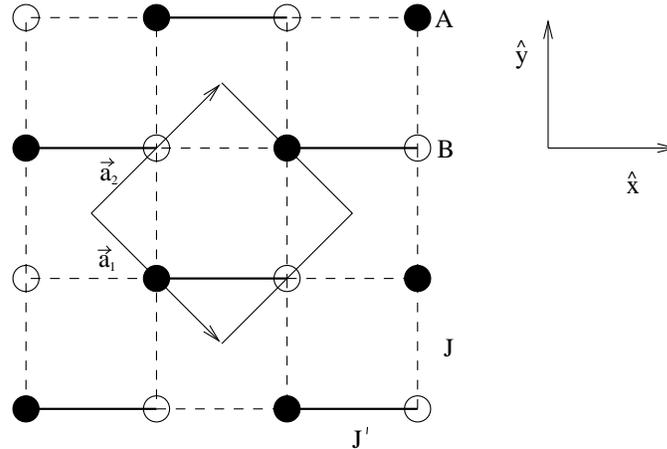


Abbildung 2.1: Illustration des  $J$ - $J'$ -Modell von Gl. (2.1) mit den zwei Arten von regelmäßig angeordneten nächste-Nachbar-Bindungen,  $J$  (gestrichelte Linien) und  $J'$  (durchgezogene Linien). Die Elementarzelle mit den beiden primitiven Translationen,  $\vec{a}_1$  und  $\vec{a}_2$ , ist eingezeichnet, desgleichen die beiden Einheitsvektoren,  $\hat{x} = (1, 0)$  und  $\hat{y} = (0, 1)$ .

Das quadratische Gitter kann in zwei äquivalente Untergitter,  $A$  und  $B$ , unterteilt werden, wie in Abb. 2.1 dargestellt ist. Damit läuft die Summe in Gl. (2.1) über alle

Plätze (also  $N/2$ ) des Untergitters  $A$ , wobei die Vektoren  $p = \{(\pm 1, 0), (0, \pm 1)\}$  die nächsten Nachbarn verbinden. Dabei beschreibt  $p_{J'} = (1, 0)$  speziell die nächste-Nachbar-Bindung mit  $J'$ . Das Modell enthält also insgesamt  $N$  Spins und  $2N$  nächste-Nachbar-Bindungen, davon  $N/2$  mit  $J'$ .

Die primitiven Translationen im Gitter sind

$$\vec{a}_1 = (1, -1) \quad \vec{a}_2 = (1, 1)$$

und das reziproke Gitter wird von  $\vec{b}_1$  und  $\vec{b}_2$  aufgespannt:

$$\vec{a}_i \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad \vec{b}_i = \frac{2\pi}{|\vec{a}_1||\vec{a}_2|} \vec{a}_i = \pi \vec{a}_i.$$

Wie in Abb. 2.1 zu erkennen ist, gibt es zwei Spins pro Elementarzelle.

### Motivation

Jede Plakette des quadratischen Gitters besteht aus drei Bindungen mit  $J = 1$  und einer Bindung mit  $J'$ . Im Falle ferromagnetischer  $J'$ -Bindungen ( $J' < 0$ ) sind die Plaketten frustriert (s. auch Abb. 1.2c in der Einleitung). Umgekehrt gibt es für antiferromagnetische  $J'$ -Bindungen ( $J' > 0$ ) keine Frustration, obwohl die Differenz in der Stärke der Kopplungen von  $J$  und  $J'$  zu *Quantenkonkurrenz* führt.

Für ein hinreichend großes  $J' > 1$  ist die Dimerisierung, d.h. die Ausbildung von lokalen Singulett, entlang der  $J'$ -Bindungen zu erwarten. Eine größere antiferromagnetische Bindung (mit  $J' > 1$ ) bewirkt zunächst, daß die mit  $J'$  gekoppelten Spins stärker antiferromagnetisch korreliert sind, aber nur eine geringere Korrelation zwischen Spins verschiedener dieser Paare vorhanden ist. Ab einem bestimmten kritischen  $J'_s$  bricht die langreichweitige Néelordnung zusammen, und es kommt zu einer ungeordneten dimerisierten Phase.

Das  $J$ - $J'$ -Modell mit dem Hamiltonoperator (2.1) erlaubt also den Einfluß der Bildung von lokalen Singulett ( $J' > 1$ ) und den der Frustration ( $J' < 0$ ) auf die Stabilität der Néelordnung innerhalb eines Modells zu studieren. Das Modell wurde früher bereits mittels Störungstheorie behandelt [51].

Ferromagnetische Bindungen in einer antiferromagnetischen Matrix werden seit einiger Zeit diskutiert [13, 55, 56, 57, 58]. Das steht vor allem im Zusammenhang mit dem Vorschlag von Aharony *et.al.* [59], lokalisierte Sauerstofflöcher in den Cu-O-Ebenen durch lokale ferromagnetische Bindungen zwischen den Kupferspins zu modellieren. Es wurde argumentiert, daß zufällige ferromagnetische Bindungen die antiferromagnetische Ordnung stark beeinflussen könnten, und damit die Entstehung eines Quantenspinflüssigkeits-Zustandes unterstützen könnten [13, 57, 58].

Auf der anderen Seite erinnert der Fall mit stärkeren antiferromagnetischen  $J'$ -Bindungen (mit  $J' > 1$ ) an die Situation in Systemen mit zwei Schichten, und an die Situation in  $\text{CaV}_4\text{O}_9$ , einem verdünnten Antiferromagneten auf dem quadratischen Gitter. In solchen Systemen führt die Konkurrenz zwischen den verschiedenen antiferromagnetischen Bindungen zu einem Phasenübergang von der antiferromagnetisch langreichweitig geordneten Phase zu einer quantenmechanisch ungeordneten Phase mit einem endlichen Gap.

## Spezialfälle

Neben den beiden erwähnten Mechanismen der Singulett-Bildung und der Frustration, die sich innerhalb des Modells beschreiben lassen, enthält es auch einige Spezialfälle.

- $J' = 1$ : Antiferromagnet auf dem quadratischen Gitter, mit langreichweitiger Ordnung im Grundzustand
- $J' = 0$ : Antiferromagnet auf dem Honigwabengitter, mit langreichweitiger Ordnung im Grundzustand
- $J' = -\infty$ : antiferromagnetisches Dreiecksgitter mit Spin 1, mit langreichweitiger Ordnung im Grundzustand
- $J' = +\infty$ : „Valence-bond“-Zustand; Grundzustand ist ein rotationsinvarianter Quanten-Dimer-Zustand mit Anregungslücke

## 2.2 Der klassische Grundzustand

Das Problem, den klassischen Grundzustand des Modells (2.1) zu bestimmen, reduziert sich im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) darauf, diesen Grundzustand für eine einzige Plakette mit vier Spins zu finden. Die folgende einfache Umformung des Hamiltonoperators (2.1) verdeutlicht das:

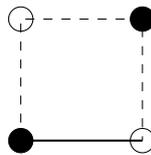
$$H = \sum_{i \in A} (J' \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+\hat{x}} + \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i-\hat{x}} + \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+\hat{y}} + \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i-\hat{y}}),$$

mit  $i' = i - \hat{x} - \hat{y}$  (da  $i \in A$  ist auch  $i' \in A$ ) folgt weiter

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i \in A} (J' \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+\hat{x}} + \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+\hat{y}}) + \sum_{i' \in A} (\mathbf{s}_{i'+\hat{x}+\hat{y}} \mathbf{s}_{i'+\hat{y}} + \mathbf{s}_{i'+\hat{x}+\hat{y}} \mathbf{s}_{i'+\hat{x}}), \\ \Rightarrow H &= \sum_{i \in A} (J' \mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+\hat{x}} + \mathbf{s}_{i+\hat{x}} \mathbf{s}_{i+\hat{x}+\hat{y}} + \mathbf{s}_{i+\hat{x}+\hat{y}} \mathbf{s}_{i+\hat{y}} + \mathbf{s}_{i+\hat{y}} \mathbf{s}_i) \end{aligned} \quad (2.2)$$

(Umordnen der Terme und Umbenennen des Summationsindex  $i'$  zu  $i$ ). Die Klammer in (2.2) beschreibt gerade die Wechselwirkungen innerhalb einer Plakette, wenn man mit der  $J'$ -Bindung beginnt, und sich entgegen dem Uhrzeigersinn bewegt.

einzelne Plakette:



Zur Bestimmung des klassischen Grundzustandes einer Plakette (s. dazu auch [60]), bei der die Spins in der  $XY$ -Ebene liegen,<sup>1</sup> wird der Klammerausdruck in (2.2) für

<sup>1</sup>Eine numerische Simulation des Systems mit Spins im dreidimensionalen Raum zeigt, daß die Grundzustandsenergie dieses planaren Grundzustandes dabei nicht unterschritten wird.

klassische Spins, die durch klassische Vektoren  $\mathbf{s}_i = s(\sin \phi_i, \cos \phi_i)$  gegeben sind, minimiert. Mit  $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j = s^2 \cos(\phi_j - \phi_i)$  folgt für den zu minimierenden Ausdruck

$$H_{\text{kl}}^{\text{Plakette}} = s^2(J' \cos(\varphi_{\hat{x}}) + \cos(-\varphi_{-\hat{y}}) + \cos(\varphi_{-\hat{x}}) + \cos(-\varphi_{\hat{y}})). \quad (2.3)$$

Die Winkel  $\varphi_{\pm\hat{x}}$  und  $\varphi_{\pm\hat{y}}$  sind die Winkel zwischen den benachbarten Spins der Plakette, konkret ist  $\varphi_p = \phi_{i+p} - \phi_i$  der Winkel zwischen  $\mathbf{s}_i$  und  $\mathbf{s}_{i+p}$ , wobei  $i$  zum Untergitter  $A$  gehört.<sup>2</sup> Aus Gründen der Symmetrie in der Gl. (2.3) muß

$$\cos(-\varphi_{-\hat{y}}) = \cos(\varphi_{-\hat{x}}) = \cos(-\varphi_{\hat{y}}) \equiv \cos(\varphi_{-\hat{x}})$$

gelten, d.h. die Beträge der Winkel  $\varphi_{\pm\hat{y}}$  und  $\varphi_{-\hat{x}}$  sind gleich. Aufgrund der ringartigen Verknüpfung der vier Spins muß die Nebenbedingung

$$\varphi_{\hat{x}} - \varphi_{\hat{y}} + \varphi_{-\hat{x}} - \varphi_{-\hat{y}} = 2\pi n, \quad n \text{ ganzzahlig}, \quad \Rightarrow \cos(-\varphi_{\hat{y}} + \varphi_{-\hat{x}} - \varphi_{-\hat{y}}) = \cos(\varphi_{\hat{x}})$$

erfüllt sein. Für die Summe der Winkel (deren Beträge gleich sind) gibt es drei Möglichkeiten,

$$-\varphi_{\hat{y}} + \varphi_{-\hat{x}} - \varphi_{-\hat{y}} = 3\varphi_{-\hat{x}}, \pm\varphi_{-\hat{x}}.$$

Dabei kann nur die erste,

$$-\varphi_{\hat{y}} + \varphi_{-\hat{x}} - \varphi_{-\hat{y}} = 3\varphi_{-\hat{x}}, \quad \text{also mit } \varphi_{\pm\hat{y}} = -\varphi_{-\hat{x}}, \quad (2.4)$$

physikalisch korrekt sein, da sonst *alle vier* klassischen Korrelationen benachbarter Spins gleich sein würden ( $\cos \varphi_{-\hat{x}} = \cos \varphi_{\hat{x}}$ ). Damit muß nun also

$$H_{\text{kl}}^{\text{Plakette}} = s^2(J' \cos(\varphi_{\hat{x}}) + 3 \cos(\varphi_{-\hat{x}})) = s^2(J' \cos(3\varphi_{-\hat{x}}) + 3 \cos(\varphi_{-\hat{x}}))$$

für  $\varphi_{-\hat{x}}$  minimiert werden,

$$\Rightarrow \cos(\varphi_{-\hat{x}}) = \begin{cases} -1 & J' > -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{1}{J'}} & J' \leq -\frac{1}{3} \end{cases}, \quad \text{wobei } \varphi_{\hat{x}} = -3\varphi_{-\hat{x}} \quad (2.5)$$

wegen der ringartigen Verknüpfung der Spins der Palette gilt. Dieser Grundzustand einer Plakette läßt sich widerspruchsfrei auf alle Plaketten des gesamten Gitters übertragen, so daß (2.5) auch für den klassischen Grundzustand des gesamten Systems gilt. Dieser wird nun weiter analysiert.

Für  $J' > -1/3$  ist der *Néelzustand* der klassische Grundzustand des  $J$ - $J'$ -Modells. Bei einem kritischen  $J'_c = -1/3$  findet klassisch ein Phasenübergang zweiter Ordnung zu einem *helixartigen Zustand* statt. Dieser Zustand wird durch den Winkel  $\Phi$  charakterisiert, der durch

$$\Phi \equiv \pi - \varphi_{-\hat{x}} \quad (2.6)$$

---

<sup>2</sup>Der Winkel zwischen  $\mathbf{s}_{i+\hat{x}}$  und  $\mathbf{s}_{i+\hat{x}+\hat{y}}$  ist also z.B.

$$\phi_{i+\hat{x}+\hat{y}} - \phi_{i+\hat{x}} = \phi_{(i+\hat{x}+\hat{y})} - \phi_{(i+\hat{x}+\hat{y})-\hat{y}} = -\varphi_{-\hat{y}}$$

da  $i + \hat{x} + \hat{y}$  zum Untergitter  $A$  gehört.

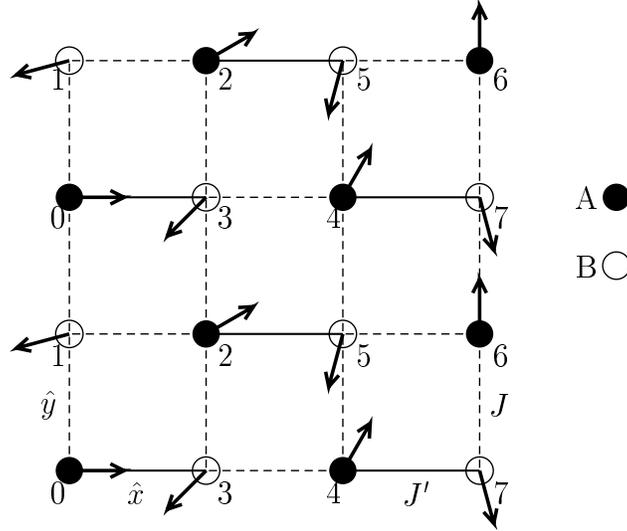


Abbildung 2.2: Darstellung des klassischen helixartigen Zustandes für das  $J$ - $J'$ -Modell von Gl. (2.1). Die Richtungen der Spins für die Untergitter  $A$  und  $B$  werden durch die Winkel  $\theta_n = n\Phi$  bzw.  $\theta_n = n\Phi + \pi$  definiert, wobei  $n = 0, 1, 2, \dots$  gilt, und  $\Phi$  der charakteristische Winkel des helixartigen Zustandes ist. Der Zustand ist hier für  $\Phi = \pi/12$  (positive Chiralität) und  $n = 0, 1, \dots, 7$  dargestellt.

definiert wird, und in Abb. 2.2 dargestellt ist. Für das so definierte  $\Phi$  folgt dann mit (2.5) für den klassische Grundzustand des  $J$ - $J'$ -Modells  $\Phi = \pm|\Phi_{\text{kl}}|$  mit

$$|\Phi_{\text{kl}}| = \begin{cases} 0 & J' > -\frac{1}{3} \\ \arccos\left(\frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{1}{J'}}\right) & J' \leq -\frac{1}{3} \end{cases}, \quad (2.7)$$

wobei die zwei verschiedenen Vorzeichen zu den zwei Chiralitäten [60] des helixartigen Zustandes gehören (s. auch Abb. 2.3). Der Fall  $\Phi = 0$  entspricht gerade dem Néelzustand. Allgemein ändert sich der klassische Wert des Winkels  $\Phi$  (in Abhängigkeit von  $J'$ ) von  $|\Phi_{\text{kl}}| = 0$  für  $J' \geq -1/3$  zu  $|\Phi_{\text{kl}}| = \pi/3$  für  $J' = -\infty$ .

Dabei entspricht  $|\Phi_{\text{kl}}| = \pi/3$  (realisiert bei  $J' = -\infty$ ) dem Grundzustand des *Spin-1-Dreiecksgitters*, wo  $\varphi_{\hat{x}} = 0$  gilt (die zwei Spins, die mit  $J'$  koppeln, formen einen Spin-1), und die Spin-1-Operatoren, die mit  $J = 1$  koppeln, im Winkel von  $120^\circ$  zueinander stehen.

Allgemein kann man die Richtungen der Spins  $\mathbf{s}_A$  und  $\mathbf{s}_B$ , die zu den Untergittern  $A$  bzw.  $B$  gehören, für den klassischen helixartigen Zustand mit dem charakteristischen Winkel  $\Phi$  wie folgt beschreiben,

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_A(\mathbf{R}) &= \hat{\mathbf{u}} \cos \mathbf{QR} + \hat{\mathbf{v}} \sin \mathbf{QR}, \\ \mathbf{s}_B(\mathbf{R} + \hat{x}) &= \hat{\mathbf{u}} \cos(\mathbf{QR} + \pi + 3\Phi) + \hat{\mathbf{v}} \sin(\mathbf{QR} + \pi + 3\Phi). \end{aligned} \quad (2.8)$$



Abbildung 2.3: Veranschaulichung der zwei verschiedenen Chiralitäten des helixartigen Zustandes (s. auch Abb. 2.2). Die linke Abbildung zeigt den Fall positiver Chiralität ( $\Phi > 0$ ) mit  $\varphi_{\hat{x}} = 3\Phi - \pi < 0$ , d.h. der Winkel zwischen den Spins, die mit  $J'$  koppeln ist negativ, der Spin des Untergitters  $A$  wird also mit negativen Drehsinn (mit dem Uhrzeigersinn) gedreht. Rechts wird analog der Fall negativer Chiralität ( $\Phi < 0$ ) dargestellt.

Hierbei sind  $\hat{\mathbf{u}}$  und  $\hat{\mathbf{v}}$  rechtwinklig zueinander stehende Einheitsvektoren im Spinraum,  $\mathbf{R}$  kennzeichnet die Plätze des Untergitters  $A$ , und  $\mathbf{Q} = (2\Phi, 0)$  ist der Neigungswinkel („pitch angle“).<sup>3</sup>

Es ist zu beachten, daß dieser allgemeine helixartige Zustand keine Periodizität in  $x$ -Richtung hat, da der Winkel  $\Phi$  im allgemeinen nicht von der Form  $m\pi/n$  (mit ganzzahligen  $n$  und  $m$ ) ist ( $\Phi$  ist also i.allg. *inkommensurabel* zu  $\pi$ ). Es ist desweiteren zu beachten, daß es in diesem Zustand nur drei verschiedene Winkel zwischen benachbarten Spins gibt, nämlich  $\pm(\pi - \Phi)$  für die Bindungen mit  $J = 1$  und  $3\Phi - \pi$  für die Bindung mit  $J'$ .

Es ist nun leicht, die klassische Grundzustandsenergie des  $J$ - $J'$ -Modells zu bestimmen, sie ist (bei  $s = 1/2$ )

$$E_{\text{kl}} = \begin{cases} -N/8(J' + 3) & J' > -\frac{1}{3} \\ N/8(J' - 1)\sqrt{1 - 1/J'} & J' \leq -\frac{1}{3} \end{cases}. \quad (2.9)$$

Das Maximum dieser Energie liegt bei  $J' = -1/2$ .

---

<sup>3</sup>Bei  $\mathbf{Q} = \pm\mathbf{k}$  wird der Strukturfaktor

$$S(\mathbf{k}) = \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\mathbf{k}} \langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle$$

unter Verwendung des helixartigen Zustandes maximal, da mit  $\mathbf{s}_A(\mathbf{R}_i)\mathbf{s}_A(\mathbf{R}_j) = \cos \mathbf{Q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$

$$S(\mathbf{k}) = \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\mathbf{k}} \frac{1}{2} \left( e^{i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\mathbf{Q}} + e^{-i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)\mathbf{Q}} \right) = \frac{1}{2} \frac{N^2}{4} (\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},0}^2 + \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{Q},0}^2)$$

folgt. Der Vektor  $\mathbf{Q}$  ist also der  $\mathbf{k}$ -Vektor des Untergitters  $A$  (und natürlich auch der von  $B$ ).

# Kapitel 3

## Coupled-Cluster-Methode

In diesem Kapitel wird die Coupled-Cluster-Methode (CCM) kurz vorgestellt (Abschnitt 3.1) und dann auf das  $J$ - $J'$ -Modell (siehe Gl. (2.1)) angewendet (Abschnitte 3.2 bis 3.5). Der Abschnitt 3.2 beschreibt die Vorgehensweise für die Berechnung des Grundzustandes. Im Abschnitt 3.3 wird der Formalismus für den angeregten Zustand behandelt, mit dem dann das Energie-Gap berechnet wird. Um u.a. die Eigenschaften und die Genauigkeit der CCM zu untersuchen, wird die Methode auch auf das (im eindimensionalen Fall) exakt lösbare anisotrope  $XY$ -Spinmodell angewendet (Abschnitt 3.6). Teile dieses Kapitels wurden in [43] und [54] veröffentlicht.

### 3.1 Vorstellung der Methode

Die Coupled-Cluster-Methode (CCM) ist eine allgemeine *ab initio* Methode zur näherungsweisen Behandlung von Quantenvielteilchensystemen. Sie ist sehr universell anwendbar und mit den erreichbaren Näherungsordnungen eine der genauesten Vielteilchenmethoden. Zu ihren Hauptvorteilen zählt, daß im thermodynamischen Limes Divergenzen automatisch vermieden werden und daß man auf eine sehr systematische Weise höhere Ordnungen betrachten kann, wodurch sich prinzipiell eine beliebige Genauigkeit erreichen läßt. Die CCM wurde 1958 von Coester und Kümmel bei der Behandlung kernphysikalischer Probleme entwickelt [27], und wird seitdem für eine wachsende Anzahl von physikalischen und chemischen Systemen verwendet (s. Ref. [28] bis [37]).<sup>1</sup>

Seit einigen Jahren wird die CCM auch auf niederdimensionale Quantenspinsysteme angewendet [38, 39]. Waren die Resultate wegen der niedrigen erreichbaren Näherungsordnungen (SUB2, LSUB4) zunächst nicht so gut, so änderte sich diese Situation mit der Nutzung von computeralgebraischen Methoden [40, 45]. Diese Verfahren ermöglichen es, die CCM in höheren Ordnungen (bis zu LSUB10) zu verwenden. Die damit erzielten Resultate (Grundzustandsenergie und magnetische Ordnungsparameter) für das  $XXZ$ -Modell auf dem quadratischen Gitter [40, 45], für das

---

<sup>1</sup>Einen guten Überblick über die CCM und ihre verschiedenen Anwendungen gibt [37], kurze zusammenfassende Darstellungen sind in [35] und [36].

antiferromagnetische Dreiecksgitter [45, 47] und für das  $J_1$ - $J_2$ -Modell [46] sind sehr gut, und mit denen der etablierten Methoden vergleichbar bzw. z.T. besser.

### 3.1.1 Theoretischer Formalismus der CCM

Im folgenden wird der Formalismus der CCM für den *Grundzustand* eines Quanten-vielteilchensystems beschrieben.

Zu Beginn muß ein *Modellzustand*  $|\Phi\rangle$  ausgewählt werden, der eine gewissen Näherung für den exakten Grundzustand des zu untersuchenden Systems darstellen soll. Es könnte z.B. der klassische Grundzustand des Systems (oder ein von ihm abgeleiteter Zustand) sein. Wichtig ist, daß der Modellzustand einen endlichen Überlapp mit dem exakten Grundzustand hat, er darf also nicht zu ihm orthogonal sein. Zu dem Modellzustand  $|\Phi\rangle$  wird eine Menge *verallgemeinerter Erzeugungs-* ( $C_I^+$ ) und dazu adjungierter *Vernichtungsoperatoren* ( $C_I$ ) definiert, für die

$$\langle\Phi|C_I^+ = 0 = C_I|\Phi\rangle \quad \forall I \neq 0, \quad C_0^+ \equiv 1, \quad (3.1)$$

$$[C_I^+, C_J^+]_- = 0 = [C_I, C_J]_- \quad (3.2)$$

gilt. Die  $C_I$  sind Mehrteilchenoperatoren (d.h. Produkte von Einteilchenoperatoren), der Index  $I$  steht also für mehrere Einteilchenindizes. Der Zustand  $|\Phi\rangle$  ist somit ein verallgemeinerter Vakuumzustand in Bezug auf die Vernichtungsoperatoren  $C_I$ . Desweiteren sollen für  $\{|\Phi\rangle; C_I^+\}$  die Orthonormalitätsbedingung

$$\langle\Phi|C_I C_J^+|\Phi\rangle = \delta_{IJ} \quad (3.3)$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_I C_I^+|\Phi\rangle\langle\Phi|C_I = 1 = |\Phi\rangle\langle\Phi| + \sum_{I \neq 0} C_I^+|\Phi\rangle\langle\Phi|C_I \quad (3.4)$$

gelten. Es ist von vornherein nicht offensichtlich, daß Modellzustände  $|\Phi\rangle$  und Mengen von Erzeugungsoperatoren  $C_I^+$  mit den obigen Eigenschaften (3.1)-(3.4) existieren. Bei den Anwendungen auf verschiedene Klassen von Vielteilchensystemen zeigt sich jedoch [33], daß es im allgemeinen recht einfach ist, solche Mengen zu finden.

Nachdem wir nun eine Menge  $\{|\Phi\rangle; C_I^+\}$  haben, können wir einen Ansatz für den exakten Ket-Grundzustand mit

$$|\Psi\rangle = e^S|\Phi\rangle, \quad S = \sum_{I \neq 0} s_I C_I^+ \quad (3.5)$$

und den Bra-Grundzustand mit

$$\langle\tilde{\Psi}| = \langle\Phi|\tilde{S}e^{-S}, \quad \tilde{S} = 1 + \sum_{I \neq 0} \tilde{s}_I C_I \quad (3.6)$$

machen.  $S$  und  $\tilde{S}$  sind die *Korrelationsoperatoren* für den Ket-Grundzustand bzw. den Bra-Grundzustand mit den dazugehörigen *Korrelationskoeffizienten*  $s_I$  bzw.  $\tilde{s}_I$ . Der

Ansatz (3.6) kennzeichnet die sogenannte *normale* CCM (NCCM), welche in der gesamten Arbeit ausschließlich verwendet wird.<sup>2</sup>

Ein Vorteil der exponentiellen Form (3.5) ist z.B. [36], daß extensive Größen wie die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) richtig skalieren, auch wenn  $S$  angenähert wird.

Die Ket- und Bra-Zustände, die durch die Gleichungen (3.5) bzw. (3.6) definiert werden, sind nicht zueinander adjungiert. Das heißt,<sup>3</sup> die CCM ist *keine variationelle* Methode, sie liefert also *keine* obere Grenze für die Grundzustandsenergie. Es sind jedoch die Normierungsrelationen

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle = 1$$

erfüllt. Eine weitere wichtige Eigenschaft ist, daß das Hellmann-Feynman-Theorem [49] für jede Näherung von  $S$  erfüllt ist [35].

Wird die stationäre Schrödingergleichung  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  für den Hamiltonoperator  $H$  des Systems von links mit  $e^{-S}$  multipliziert, so folgt mit (3.5)

$$\begin{aligned} e^{-S}H|\Psi\rangle &= e^{-S}E|\Psi\rangle, \quad \Rightarrow e^{-S}He^S|\Phi\rangle = e^{-S}Ee^S|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle, \\ &\Rightarrow E = \langle \Phi | e^{-S}He^S | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Das ist eine Gleichung für die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von den Ket-Korrelationskoeffizienten  $s_I$ .

Die Ähnlichkeitstransformation  $e^{-S}He^S$  in Gl. (3.7) ist von großer Bedeutung in der CCM, und kann für jeden quantenmechanischen Operator in einer Reihe von Vertauschungsrelationen dargestellt werden:

$$e^{-S}He^S = H + [H, S]_- + \frac{1}{2!}[[H, S]_-, S]_- + \dots \quad (3.8)$$

Es ist eine sehr wichtige Eigenschaft, daß (3.8) nach einigen Termen abbricht, wenn  $H$  (in der Form der zweiten Quantisierung) nur Produkte mit einer endlichen Anzahl von Einteilchenoperatoren enthält. So enthält der Hamiltonoperator (2.1) nur

---

<sup>2</sup>In der noch allgemeineren *erweiterten* CCM (ECCM) [33] wird auch der Bra-Grundzustand durch einen exponentiellen Ansatz  $\langle \tilde{\Psi} | = \langle \Phi | e^{\tilde{S}} e^{-S}$  dargestellt. Die Methode führt zu deutlich komplizierteren Gleichungen. In [48] wurde eine ECCM Rechnung für das  $XXZ$ -Spinmodell in SUB2 Näherung durchgeführt; die Resultate sind deutlich besser als bei der entsprechenden NCCM-SUB2 Näherung.

<sup>3</sup>Seien  $|\Psi_n\rangle$  die orthonormierten Eigenfunktionen von  $H$  zum Eigenwert  $E_n \geq E_0$  ( $E_0$  sei hier die Grundzustandsenergie), so folgt für den Ket- und Bra-Zustand der CCM

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

Da über die Vorzeichen der  $\tilde{a}_n^* a_n$  keine Aussage getroffen werden kann und sie insbesondere nicht positiv sein müssen (es ist nur die Normierung  $\langle \tilde{\Psi} | \Psi \rangle = 1 = \sum_n \tilde{a}_n^* a_n$  bekannt), kann man  $\langle \tilde{\Psi} | H | \Psi \rangle$  nicht nach oben abschätzen. Bei  $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle$  könnte man dagegen sofort  $\sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |a_n|^2$  schreiben, und hätte eine obere Grenze für die Grundzustandsenergie.

Produkte mit zwei Einteilchenoperatoren (d.h. Spinoperatoren, s. weiter unten), und (3.8) bricht nach dem dritten Term ab; die Transformation kann also *exakt* berechnet werden, unabhängig davon wie  $S$  gewählt wird.<sup>4</sup>

Die Gleichungen für die Korrelationskoeffizienten für den Ket- und Bra-Grundzustand ( $s_I$  bzw.  $\tilde{s}_I$ ) kann man dadurch bekommen, daß man fordert, daß der Erwartungswert  $\bar{H} = \langle \tilde{\Psi} | H | \Psi \rangle$  in Bezug auf die unabhängigen Variablen  $s_I$  und  $\tilde{s}_I$  stationär ( $\delta \bar{H} = 0$ ) ist, man erhält

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \tilde{s}_I} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \langle \Phi | C_I e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = 0 \quad \forall I \neq 0, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial s_I} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \langle \Phi | \tilde{S} e^{-S} [H, C_I^+] e^S | \Phi \rangle = 0 \quad \forall I \neq 0. \quad (3.10)$$

Das sind ein *nichtlineares* Gleichungssystem für die  $s_I$  (Gl. (3.9)) und ein *lineares* Gleichungssystem für die  $\tilde{s}_I$  (in Abhängigkeit von den  $s_I$ , Gl. (3.10)). Damit ist der Grundzustand bestimmt, und für den Erwartungswert eines beliebigen Operators  $A$  ergibt sich

$$\bar{A} = \langle \tilde{\Psi} | A | \Psi \rangle. \quad (3.11)$$

Wegen (3.9) ist gewährleistet, daß der Erwartungswert  $\bar{H}$  gleich der Grundzustandsenergie (3.7) ist.

Bis hierher waren alle Betrachtungen exakt. Eine *Näherung* kommt nun dadurch zustande, daß bei dem Ansatz für  $S$  (3.5) (und analog für  $\tilde{S}$ ) die Summe über die Konfigurationen  $I$  irgendwo abgebrochen wird, die Summe also nicht mehr über den vollständigen Satz aller Konfigurationen gebildet wird, was auch i.allg. unmöglich wäre. Die Anzahl der berücksichtigten Konfigurationen muß dabei für  $S$  und  $\tilde{S}$  gleich sein, sonst gibt es z.B. in (3.9) nicht die gleiche Anzahl von Gleichungen und Unbekannten. Diese einzige Näherung innerhalb der CCM kann gut kontrolliert und physikalisch begründet werden, was einen wesentlichen Vorteil gegenüber anderen Methoden darstellt.

### 3.1.2 Allgemeine Schritte beim Anwenden der CCM

Nachdem im letzten Unterabschnitt die theoretischen Grundlagen der CCM dargelegt wurden, gibt es hier eine kurze zusammenfassende Darstellung der durchzuführenden Schritte bei Anwendung der CCM.

1. Wahl eines Modellzustandes mit dazugehörigem Satz von Operatoren  $\{|\Phi\rangle; C_I^+\}$
2. Wahl einer geeigneten Näherung für den Korrelationsoperator  $S$

Die Wahl bei diesen ersten beide Schritten kann und sollte physikalisch motiviert sein. Für den Modellzustand kommt also z.B. der klassische Grundzustand in Frage oder ein Zustand von dem angenommen wird, daß er in einem bestimmten Grenzfall

---

<sup>4</sup>Würde man dagegen für den Bra-Zustand einfach (in einer variationellen Formulierung)  $\langle \tilde{\Psi} | = (|\Psi\rangle)^+$  wählen, so müßte  $e^{S^+} H e^S$  berechnet werden. Dieser Ausdruck läßt sich nicht exakt berechnen [35], es wäre also eine (möglicherweise schlecht kontrollierbare) weitere Näherung notwendig.

exakt wird<sup>5</sup>.

Bei der Näherung von  $S$  muß ein möglichst physikalisch motiviertes Schema gefunden werden, mit dem die Näherung systematisch verbessert werden kann. Die praktische Implementation ist sehr aufwendig.

Die weiteren Schritte sind dann durch einen rein mathematischen Algorithmus vorherbestimmt.

**3.** Aufstellen der Ket-Grundzustandsgleichungen  $\langle \Phi | C_I e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = 0$

Das ist der aufwendigste Teil der ganzen Methode.

**4.** Lösen der Ket-Grundzustandsgleichungen (nichtlineares Gleichungssystem)

$$\Rightarrow s_I \quad \Rightarrow |\Psi\rangle \quad \Rightarrow E$$

**5.** Aufstellen und Lösen der Bra-Grundzustandsgleichungen (lineares GLS)

$$\Rightarrow \tilde{s}_I \quad \Rightarrow \langle \tilde{\Psi} | \quad \Rightarrow \bar{A} = \langle \tilde{\Psi} | A | \Psi \rangle$$

Die letzten beiden Schritte sind einfache Standardprozeduren, welche dennoch sehr viel Rechenzeit und Computerspeicher erfordern können.

## 3.2 Der Grundzustand

Nach den einführenden Betrachtungen des letzten Abschnittes soll nun die CCM auf das  $J$ - $J'$ -Spinmodell angewendet werden (s. auch Ref. [38] bis [47] für die Anwendung der CCM auf verschiedene Spinsysteme, dabei insbesondere [39] und [45]). Der erste Schritt ist die Auswahl eines *Modellzustandes*  $|\Phi\rangle$ .

### 3.2.1 Der Modellzustand

Eine mögliche Wahl für Quantenspinsysteme ist ein klassischer Spinzustand [39], bei dem die Spins i.allg. in viele verschiedene Richtungen zeigen. Entsprechend wird als CCM-Modellzustand für das System (2.1) der klassische helixartige Zustand, welcher in Abb. 2.2 dargestellt ist, verwendet. Dieser Modellzustand steht in Zusammenhang mit dem klassischen Grundzustand von (2.1).

Um die CCM-Rechnungen durchzuführen, soll jeder Gitterplatz gleichartig behandelt werden. Dazu werden die Koordinatensysteme der Spins *lokal* so gedreht, daß alle Spins (in den neuen lokalen rotierten Achsen) in eine Richtung zeigen.

Zunächst einige Bemerkungen zur *Behandlung von Koordinatentransformationen*.

Jeder Zustand eines quantenmechanischen Spinsystems läßt sich i.allg. als Linearkombination von Produkten von *up*- und *down*-Zuständen der einzelne Spins beschreiben. In der üblichen Notation der Drehimpulsalgebra bedeutet das, daß die Spinzustände in positive  $z$ - bzw. negative  $z$ -Richtung (Quantisierungsachse) zeigen müssen. Bei den

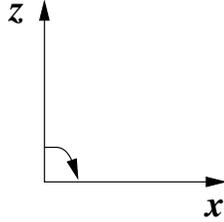
---

<sup>5</sup>So könnte z.B. für das  $J$ - $J'$ -Modell für große  $J'$  auch ein dimerisierter Zustand als Modellzustand benutzt werden (an Stelle des Néelzustandes, s. weiter unten).

hier verwendeten Spin-1/2-Operatoren heißt das ( $\hbar \equiv 1$  gesetzt) z.B. für die einzelnen Komponenten der Spinoperatoren angewendet auf den up-Zustand (in  $+z$ -Richtung)

$$s^x|\uparrow\rangle = (1/2)|\downarrow\rangle, \quad s^y|\uparrow\rangle = (1/2)i|\downarrow\rangle, \quad s^z|\uparrow\rangle = (1/2)|\uparrow\rangle.$$

Um nun beispielsweise die Wirkung der Spinoperatoren auf  $|\rightarrow\rangle$  zu berechnen, muß man eine *Koordinatentransformation* (eine Drehung des Koordinatensystems) um die  $y$ -Achse (positiver Drehsinn) durchführen, so daß  $|\rightarrow\rangle$  in  $+z$ -Richtung in den neuen Koordinaten (mit Tilde) liegt (dort mit  $|\tilde{\uparrow}\rangle$  beschrieben).



$$\begin{array}{l} |\rightarrow\rangle \rightarrow |\tilde{\uparrow}\rangle \\ s^x \rightarrow \tilde{s}^z, \quad s^y \rightarrow \tilde{s}^y, \quad s^z \rightarrow -\tilde{s}^x \end{array}$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} s^x|\rightarrow\rangle &= \tilde{s}^z|\tilde{\uparrow}\rangle = (1/2)|\tilde{\uparrow}\rangle = (1/2)|\rightarrow\rangle, \\ s^y|\rightarrow\rangle &= \tilde{s}^y|\tilde{\uparrow}\rangle = (1/2)i|\tilde{\downarrow}\rangle = (1/2)i|\leftarrow\rangle, \\ s^z|\rightarrow\rangle &= -\tilde{s}^x|\tilde{\uparrow}\rangle = -(1/2)|\tilde{\downarrow}\rangle = -(1/2)|\leftarrow\rangle. \end{aligned}$$

Die neuen Spinoperatoren wirken auf den neuen Zustand genau wie gewöhnliche Spinoperatoren, d.h. man kann die Spinoperatoren nach der Transformation genauso benutzen wie in der üblichen Notation bei Zuständen in  $z$ -Richtung.

### Verallgemeinerte Operatoren $C_I$

Für die Spinerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $s^\pm = s^x \pm is^y$  gilt

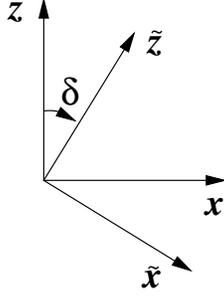
$$s^+|\uparrow\rangle = 0, \quad s^-|\downarrow\rangle = 0, \quad (s^-)^+ = s^+.$$

So ist z.B.  $s^+$  ein Vernichtungsoperator ( $C_I$ ) bei einem Vakuumzustand  $|\uparrow\rangle$ , das gleiche gilt für  $s^-$  in Bezug auf  $|\downarrow\rangle$ ;  $s^-$  und  $s^+$  sind dann die jeweiligen Erzeugungsoperatoren ( $C_I^+$ ). Der klassische helixartige Zustand (s. Abb. 2.2) ist ein Produkt von einzelnen Spinzuständen, die in verschiedene Richtungen zeigen (beim Néelzustand nur in  $\pm z$ -Richtung). Um für einen solchen Modellzustand in zweckmäßiger Weise verallgemeinerte Operatoren zu definieren, wird für jeden Einzelspinzustand eine *lokale Koordinatentransformation* um die  $y$ -Achse durchgeführt [39], so daß alle Spinzustände (in den neuen Koordinaten) in  $-z$ -Richtung, d.h. nach unten zeigen. Alle Einzelspinzustände werden also down-Zustände in Bezug auf die übliche Notation der Spinoperatoren, damit folgt für den CCM-Modellzustand mit den dazugehörigen verallgemeinerten Operatoren

$$|\Phi\rangle = |\cdots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \cdots\rangle, \quad C_I^+ = s_r^+, s_r^+ s_{r'}^+, s_r^+ s_{r'}^+ s_{r''}^+, \cdots \quad (3.12)$$

(wobei die  $r, r', r''$  beliebige Gitterplätze bezeichnen).

Eine Rotation des lokalen Koordinatensystems (um die  $y$ -Achse) für den Spin  $\mathbf{s}_i$  um den Winkel  $\delta_i$ ,



Rotation der Achsen um den Winkel  $\delta$

also

$$\begin{aligned} s_i^x &\rightarrow \cos \delta_i \tilde{s}_i^x + \sin \delta_i \tilde{s}_i^z \\ s_i^y &\rightarrow \tilde{s}_i^y \\ s_i^z &\rightarrow -\sin \delta_i \tilde{s}_i^x + \cos \delta_i \tilde{s}_i^z, \end{aligned} \quad (3.13)$$

soll dazu führen, daß der Spin in den neuen lokalen Koordinaten (mit Tilde) in  $-z$ -Richtung zeigt (analog ist ein Winkel  $\delta_j$  für den Spin  $\mathbf{s}_j$  nötig). Im folgenden wird die Tilde weggelassen, da keine Verwechslungen möglich sind. Damit erhält man für das Produkt zweier Spins  $\mathbf{s}_i$  und  $\mathbf{s}_j$ , deren lokales Koordinatensystem um den Winkel  $\delta_i$ , bzw.  $\delta_j$  gedreht wurde,  $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rightarrow (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j)_\varphi$ ; dabei ist

$$\begin{aligned} (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j)_\varphi &\equiv \sin \varphi [s_i^x s_j^z - s_i^z s_j^x] + \cos \varphi [s_i^x s_j^x + s_i^z s_j^z] + s_i^y s_j^y \\ &= \sin \varphi [s_i^x s_j^z - s_i^z s_j^x] + \cos \varphi s_i^z s_j^z \\ &\quad + \frac{1}{2} (\cos \varphi + 1) [s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y] + \frac{1}{2} (\cos \varphi - 1) [s_i^x s_j^x - s_i^y s_j^y] \\ \Rightarrow (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j)_\varphi &= \frac{1}{2} \sin \varphi [s_i^+ s_j^z - s_i^z s_j^+ + s_i^- s_j^z - s_i^z s_j^-] + \cos \varphi s_i^z s_j^z \\ &\quad + \frac{1}{4} (\cos \varphi + 1) [s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+] \\ &\quad + \frac{1}{4} (\cos \varphi - 1) [s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-], \end{aligned} \quad (3.14)$$

und  $\varphi = \delta_j - \delta_i$ . Das Produkt zweier Spins ist in den transformierten Koordinaten also nur vom Winkel *zwischen* den Spins abhängig, wobei aber das Vorzeichen dieses Winkels zu beachten ist. Für einen Néel-artigen Zustand ist der Winkel zwischen Spins verschiedener Untergitter  $\pi$ , mit (3.14) folgt

$$\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \Big|_{i \in A, j \in B}^{\text{Néel}} \rightarrow -s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y - s_i^z s_j^z = -(s_i^z s_j^z + 1/2(s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-)). \quad (3.15)$$

Unter Verwendung des klassischen helixartigen Zustandes (2.8) mit dem charakteristischen Winkel  $\Phi$  folgt für den Hamiltonoperator (2.1) mittels (3.14) in den lokalen Koordinaten

$$H = \sum_{i \in A} \sum_p (1 + \delta_{p,p'}) (J' - 1) (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_{i+p})_{\varphi_p}, \quad (3.16)$$

wobei für die Winkel zwischen benachbarten Spins

$$\varphi_{\pm \hat{y}} = \pi + \Phi, \quad \varphi_{-\hat{x}} = \pi - \Phi, \quad \varphi_{\hat{x}} = \pi + 3\Phi \quad (3.17)$$

gilt. Es ist zu beachten, daß der allgemeine helixartige Zustand (Abb. 2.2) keine Translationssymmetrie in  $x$ -Richtung hat. Dennoch hat der transformierte Hamiltonoperator (3.16) diese Symmetrie, da er nur von Winkeln (also nach Gl. (3.17)) zwischen benachbarten Spins abhängt. Weiter ist zu bemerken, daß im Falle des Néel-Modellzustandes ( $\Phi = 0$ ) für den Winkel benachbarter Spins  $\varphi_p = \pi$  gilt.

Für den transformierten Hamiltonoperator (3.16) sind also  $\{|\Phi\rangle; C_I^+\}$  nach (3.12) ein Modellzustand mit dazugehörigem Satz verallgemeinerter Operatoren.

### 3.2.2 Approximationsschema – LSUB $n$

Als nächster Schritt muß eine geeignete Näherung für den Korrelationsoperator  $S$  gefunden werden. Analog zu (3.5) hat man mit Gl. (3.12) als allgemeinen Ausdruck für den Korrelationsoperator für Quantenspinsysteme

$$S = \sum_I [I] C_I^+ = \sum_{l=1}^{\infty} A_l \quad (3.18)$$

$$\text{mit } A_l \equiv \sum_{i_1 i_2 \dots i_l} [i_1 i_2 \dots i_l] s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ \dots s_{i_l}^+. \quad (3.19)$$

Dabei ist  $I = i_1 i_2 \dots i_l$  eine Konfiguration und  $[I]$  ist der dazugehörige Korrelationskoeffizient des Ket-Grundzustandes.<sup>6</sup> Die Summation in Gl. (3.19) erfolgt über *alle* Gitterplätze. Folgende *Schemata* [39] sind bei der Näherung von  $S$  gebräuchlich:

$$\text{SUB}n: S = \sum_{l=1}^n A_l \quad (\text{Konfigurationen mit bis zu } n \text{ Spins}), \quad (3.20)$$

$$\text{LSUB}n: I \in \text{SUB}n \quad \text{mit } K(I) < n \quad (3.21)$$

$$\text{mit } K(I) = K(i_1 i_2 \dots i_l) = \max_{a,b=1\dots l} d(i_a, i_b), \quad d(i, j) = |x_j - x_i| + |y_j - y_i|.$$

Bei beiden Schemata gibt es bis zu  $n$  Spins in einer Konfiguration, aber bei der LSUB $n$  ist der Abstand  $d(i, j)$  (hier in 2D angegeben; Abstand benachbarter Gitterpunkte ist 1) zwischen Spins innerhalb einer Konfiguration begrenzt. LSUB $n$  enthält also nur Konfigurationen, die in ein Gebiet mit nicht mehr als  $n$  aneinander angrenzender Gitterplätze hineinpassen (s. auch Anhang A.1); es ist eine Untermenge der SUB $n$ .<sup>7</sup>

Die volle SUB $n$ -Approximation ist jenseits von  $n = 2$  (SUB2 wurde auch hier für den Néel-Modellzustand behandelt, s. Anhang A.3) schwer zugänglich, da die Gleichungen, die dabei auftreten (in [39] sind die SUB4-Gleichungen für das  $XXZ$ -Modell angegeben) nicht gelöst werden können. Es wurde z.B. noch nie eine volle SUB4-Approximation für Spinsysteme durchgeführt.

<sup>6</sup>  $s_I$ , die bisherige Bezeichnung für  $[I]$ , wird nicht mehr verwendet, da  $I$  nun in seine Einteilchenindizes unterteilt wird, welche mit der neuen Schreibweise besser lesbar sind.

<sup>7</sup>LSUB ist also eine *lokale* SUB-Näherung. Es gibt ferner noch die allgemeinere SUB $n - m$  Approximation, auch eine Untermenge der SUB $n$ , bei der nur die Konfigurationen  $I$  mit  $K(I) < m$  genommen werden, d.h. SUB $n - m$  mit  $m = n$  ist identisch LSUB $n$ .

Hier wird im weiteren ausschließlich die LSUB $n$ -Approximation benutzt, die bereits erfolgreich für Quantenspinsysteme eingesetzt wurde (z.B. [40, 45]).

Aufgrund der Eigenschaften des konkreten Systems und des Modellzustandes verschwinden für einige Konfigurationen die Koeffizienten.

Da die Spins in den hier betrachteten Modellen immer **halbzahlig** sind und daher  $(s^+)^2|\downarrow\rangle = 0$  ist, folgt, daß in  $A_l$  (s. Gl. (3.19)) nicht zwei (oder mehr) Spinoperatoren zum gleichen Platz gehören dürfen. Damit ist  $[i_1 i_2 \cdots i_l] = 0$ , wenn zwei (oder mehr) Indizes gleich sind.

Eine andere Eigenschaft ist die mögliche  $s_T^z$ -**Erhaltung**.

Die z-Komponente des totalen Spins,  $s_T^z = \sum_i s_i^z$  (Summe über alle Gitterplätze), vertauscht immer mit dem Hamiltonoperator (2.1) (sie vertauscht mit  $H$  für alle  $XXZ$ -Modelle also auch für alle Heisenbergmodelle), ist also eine gute Quantenzahl. Dagegen ist im vorliegenden Fall nur der Néel-Modellzustand (Spinzustände nur in  $\pm z$ -Richtung) ein Eigenzustand von  $s_T^z$ , während der allgemeinere helixartige Modellzustand (Spinzustände in verschiedene Richtungen) *kein* Eigenzustand von  $s_T^z$  ist (z.B. Zustand in x-Richtung:  $s^z|\rightarrow\rangle = -(1/2)|\leftarrow\rangle$ ).<sup>8</sup>

Daher kann man  $s_T^z$  bei Wahl des Néelzustandes als CCM-Modellzustand explizit erhalten, d.h. man verwendet nur Konfigurationen, die keine Änderung von  $s_T^z$  in Bezug auf den Néel-Modellzustand bewirken. Wenn also  $s_{A(B),tot}^z$  die z-Komponente für Spins des A(B)-Untergitters ist, so folgt für das *transformierte*  $s_T^z$  (immer im Fall des Néel-Modellzustandes)

$$s_T^z = s_{A,tot}^z - s_{B,tot}^z.$$

Die  $s_T^z$ -Erhaltung bedeutet also, daß für jede Konfiguration die Anzahl der erzeugten Spins im A-Untergitter gleich der Anzahl der erzeugten Spins im B-Untergitter sein muß, mit (3.19) folgt u.a.

$$\Rightarrow A_1 = A_3 = A_5 = \cdots = 0,$$

d.h. alle Konfigurationen mit einer ungeraden Anzahl von Spins verschwinden. Das heißt z.B., daß LSUB5 zwar einige Konfigurationen mehr als LSUB4 enthält (nämlich u.a. Konfigurationen mit vier Spins auf einem Gebiet von fünf aneinander angrenzenden Gitterplätzen), aber der Hauptteil der Konfigurationen von LSUB5 (verbundene Konfigurationen mit fünf Spins) verschwindet. Außerdem hat LSUB3 nicht mehr Konfigurationen als LSUB2, da es keine zwei Spins im Abstand zwei geben kann, die nicht auf dem gleichen Untergitter liegen. Aus diesen Gründen wird LSUB3, LSUB5 usw. nicht verwendet. Für den allgemeinen helixartigen Modellzustand ist  $A_3, A_5$  usw. nicht Null, aus Gründen der Konsistenz wird aber auch für diesen Bereich LSUB3, LSUB5 usw. nicht verwendet.

---

<sup>8</sup>Analog dazu ist der *transformierte* Modellzustand  $|\Phi\rangle = |\cdots \downarrow\downarrow\downarrow \cdots\rangle$ , d.h. der Modellzustand nach den lokalen Koordinatentransformationen (3.13) für die einzelnen Spins, immer ein Eigenzustand von  $s_T^z = \sum_i s_i^z$  (mit  $s_i^z$  in den lokalen Koordinaten), wohingegen dieses  $s_T^z$  i.allg. nicht mit dem transformierten Hamiltonoperator (3.16) vertauscht; es vertauscht lediglich bei Verwendung des Néel-Modellzustandes ( $\Phi = 0$ ). Selbstverständlich vertauscht das transformierte  $s_T^z$  (also  $s_T^z = \sum_i (-\sin \delta_i s_i^x + \cos \delta_i s_i^z)$  mit  $s_i^x$  und  $s_i^z$  in den lokalen Koordinaten) immer mit dem transformierten Hamiltonoperator.

## Gittersymmetrien – fundamentale Konfigurationen

Aufgrund der geometrischen Symmetrien des Gitters (Translations- und Punktsymmetrien) sind viele Korrelationskoeffizienten  $[i_1 i_2 \cdots i_l]$  gleich, diese gehören dann zu einer *fundamentalen Konfiguration*. Fundamentale Konfigurationen sind also alle die Konfigurationen, deren Koeffizienten  $[i_1 i_2 \cdots i_l]$  auch noch nach Berücksichtigung der Gittersymmetrien verschieden sind.

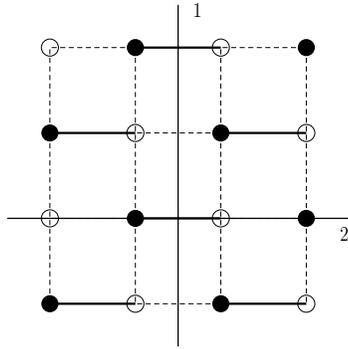
Für die hier betrachteten unendlichen Systeme gibt es auch bei einer LSUB $n$ -Näherung eine *unendliche* Anzahl von Konfigurationen, aber die Gittersymmetrien können dann bewirken, daß es nur eine *endliche* Anzahl von *fundamentalen* Konfigurationen gibt. Das bedeutet aber, daß  $S$  in (3.18) aus einer endlichen Summe von Erzeugungsoperatoren gebildet werden kann.

Neben der *Translationsinvarianz* des Modells, das eine Verschiebung um  $T$  mit

$$T = (n + m)\hat{x} + (m - n)\hat{y}, \quad n, m \text{ ganzzahlig}; \quad \hat{x} = (1, 0), \quad \hat{y} = (0, 1) \quad (3.22)$$

erlaubt, gibt es bei den *Punktsymmetrien* Unterschiede je nach gewähltem Modellzustand.

Der ursprüngliche Hamiltonoperator (2.1) besitzt vier Punktsymmetrien, das sind neben der Identität eine Spiegelung an der x-Achse und y-Achse (letztere verläuft in der Mitte zweier Gitterpunkte) und eine Kombination beider Symmetrien.



Reflexionsachsen entlang der x-Achse  
(2) und der y-Achse (1)

$$\begin{aligned} x \rightarrow x, \quad y \rightarrow y; & \quad x \rightarrow x, \quad y \rightarrow -y \\ x \rightarrow -(x + 1), \quad y \rightarrow y; & \quad x \rightarrow -(x + 1), \quad y \rightarrow -y \end{aligned} \quad (3.23)$$

Diese vier Punktsymmetrien besitzt auch der Néel-Modellzustand, und somit der transformierte Hamiltonoperator in diesem Fall.

Dagegen hat der helixartige Modellzustand nur zwei Punktsymmetrien

$$x \rightarrow x, \quad y \rightarrow y; \quad x \rightarrow x, \quad y \rightarrow -y, \quad (3.24)$$

und nur diese beiden besitzt dann auch der transformierte Hamiltonoperator. Nur sie können bei der Bestimmung der fundamentalen Konfigurationen in diesem Fall benutzt werden.

Was bleibt, ist das geometrische Problem alle möglichen fundamentalen Konfigurationen, d.h. alle möglichen verbundenen und nichtverbundenen Strukturen einer bestimmten Größe auf einem zweidimensionalen quadratischen Gitter zu finden, welche obigen Symmetrien genügen. Desweiteren wird die Anzahl dieser Konfiguration

Tabelle 3.1: Anzahl der fundamentalen Grundzustandskonfigurationen in der LSUB $n$ -Näherung für das  $J$ - $J'$ -Modell (2.1) unter Verwendung des Néelzustandes ( $\Phi = 0$ ) und des helixartigen Zustandes ( $\Phi \neq 0$ ) als Modellzustand für die CCM. Weiter ist die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für den angeregten Zustand unter Verwendung eines Néelzustandes als CCM-Modellzustand angegeben.

LSUB $n$	Grundzustand: $\Phi = 0$	$\Phi \neq 0$	angeregter Zustand: $\Phi = 0$
2	3	5	1
4	22	76	16
6	267	1638	331
8	4986	42160	7863

durch die Forderung der  $s_T^z$ -Erhaltung im Falle des Néel-Modellzustandes verringert. Der Anhang A.1 bringt Einzelheiten, wie dieses Problem gelöst wurde. Die Anzahl der so erhaltenen fundamentalen Konfigurationen wird in Tab. 3.1 angegeben.

### 3.2.3 Der Ket-Grundzustand

#### Aufstellen der Ket-Zustandsgleichungen

Nachdem nun alle fundamentale Konfigurationen gefunden wurden, sind im nächsten Schritt die Ket-Zustandsgleichungen (3.9) aufzustellen. Für jede fundamentale Konfiguration gibt es genau eine Gleichung.

Zunächst werden aber keine Näherungen (z.B. LSUB $n$ ) für  $S$  betrachtet. So ist

$$\langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- \cdots s_{j_M}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = 0 \quad (3.25)$$

die Ket-Gleichung für die Konfiguration  $j_1 j_2 \cdots j_M$  mit dem Hamiltonoperator (3.16) und dem Ket-Korrelationsoperator  $S$  in der *allgemeinen* Form nach (3.18).

Der Ausdruck  $e^{-S} H e^S$  ist eine *Ähnlichkeitstransformation* (3.8) für den Operator  $H$ , der transformierte Operator wird durch ein Dach ( $\hat{\phantom{A}}$ ) gekennzeichnet:

$$\hat{A} \equiv e^{-S} A e^S. \quad (3.26)$$

Für zwei Operatoren  $A$  und  $B$  gilt

$$\hat{A}\hat{B} = e^{-S} A e^S e^{-S} B e^S = e^{-S} A B e^S = \widehat{AB}.$$

Diese Eigenschaft ermöglicht es die Transformationen für die einzelnen Bestandteile von  $H$  (d.h.  $s^+$ ,  $s^-$ ,  $s^z$ ) einzeln vorzunehmen. Das erleichtert die Berechnung sehr.

Die Ket-Gleichungen werden in zwei Schritten bestimmt. Zunächst wird  $e^{-S} H e^S | \Phi \rangle$  so umgeformt, daß es nur noch Spinerzeugungsoperatoren enthält [45].

Unter Verwendung von

$$\begin{aligned}
F_k &\equiv \sum_{l=0} (l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [ki_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ = [k] + 2 \sum_i [ki] s_i^+ + \dots \\
G_{km} &\equiv \sum_{l=0} (l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [kmi_1 \dots i_l] s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ = 2[km] + 6 \sum_i [kmi] s_i^+ + \dots
\end{aligned} \tag{3.27}$$

erhält man mit (3.14) für die einzelnen Terme in  $H$  nach der Ähnlichkeitstransformation, angewendet auf  $|\Phi\rangle$  (bei  $k \neq m$ ) (Einzelheiten im Anhang A.2)

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{S}}_k \hat{\mathbf{S}}_m)_\varphi |\Phi\rangle = & \frac{1}{2} \sin \varphi [ (F_m - F_k - F_k^2 F_m + F_k F_m^2 - 2F_k G_{km} + 2F_m G_{km}) s_k^+ s_m^+ \\
& + (-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} F_k^2 - F_k F_m - G_{km}) s_k^+ \\
& + (\frac{1}{2} - \frac{1}{2} F_m^2 + F_k F_m + G_{km}) s_m^+ \\
& - \frac{1}{2} F_k + \frac{1}{2} F_m ] |\Phi\rangle \\
& + \cos \varphi [ (G_{km} + F_k F_m) s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} F_k s_k^+ - \frac{1}{2} F_m s_m^+ + \frac{1}{4} ] |\Phi\rangle \\
& + \frac{1}{4} (\cos \varphi + 1) [ (-F_m^2 - F_k^2) s_k^+ s_m^+ + F_m s_k^+ + F_k s_m^+ ] |\Phi\rangle \\
& + \frac{1}{4} (\cos \varphi - 1) [ (1 + 2G_{km}^2 + 4F_k F_m G_{km} + F_k^2 F_m^2) s_k^+ s_m^+ \\
& - (2G_{km} F_m + F_k F_m^2) s_m^+ - (2G_{km} F_k + F_k^2 F_m) s_k^+ \\
& + G_{km} + F_k F_m ] |\Phi\rangle.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Mit (3.16) folgt dann  $\hat{H}|\Phi\rangle$ , ein Ausdruck, der nur noch Spinerzeugungsoperatoren enthält.

Im zweiten Schritt werden alle die Terme in  $e^{-S} H e^S |\Phi\rangle$  ausgewählt, deren Indizes der  $s^+$ -Operatoren genau mit den Indizes  $j_1 j_2 \dots j_M$  der  $s^-$ -Operatoren in (3.25), die auf  $e^{-S} H e^S |\Phi\rangle$  angewendet werden, übereinstimmen [45]. Wegen

$$\langle \Phi | s_i^- s_j^+ | \Phi \rangle = \delta_{ij}$$

erhält man auf diese Weise alle Terme der Ket-Gleichung für die Konfiguration  $j_1 j_2 \dots j_M$ .

Während der Ausdruck (3.28) formal allgemein gilt, wird jetzt die Näherung (LSUB $n$ ) für  $S$  (und damit für die  $F_k$  und  $G_{km}$  nach (3.27)) berücksichtigt. Es werden nur die Ket-Gleichungen für die (nach LSUB $n$ ) fundamentalen Konfigurationen bestimmt. Hierauf wird im Anhang A.2 ausführlich eingegangen.

### Lösen der Ket-Zustandsgleichungen

Die Ket-Zustandsgleichungen sind i.allg. nichtlineare Gleichungen verschiedener Ket-Korrelationskoeffizienten  $[i_1 i_2 \dots i_l]$  der fundamentalen Konfigurationen, die Gleichungen bilden somit zusammen ein nichtlineares Gleichungssystem mit den Ket-Korrelationskoeffizienten als Unbekannten.

Das Gleichungssystem wird mit der Newton-Raphson-Methode numerisch gelöst. Dazu wird ein Startwert für die Korrelationskoeffizienten vorgegeben, der iterativ verbessert wird, und schließlich gegen eine Lösung des nichtlinearen GLS konvergiert. Es ist denkbar, daß das Verfahren nicht konvergiert, oder gegen eine unphysikalische

Tabelle 3.2: Werte der Ket-Korrelationskoeffizienten für den Spezialfall  $J' = 1$  (entspricht dem einfachen quadratischen Gitter) für die LSUB2- und die LSUB4-Näherung bei Verwendung eines Néel-Modellzustandes. Die Koeffizienten sind durch die Form der dazugehörigen Konfigurationen auf dem Gitter gekennzeichnet (s. auch Anhang A.1).

	$\begin{array}{cc} \times & \times \\ \times & \times \end{array}$	$\begin{array}{ccc} \times & & \\ \times & \times & \times \end{array}$	$\begin{array}{cc} \times & \times \\ \times & \times \end{array}$	$\begin{array}{ccc} \times & \times & \\ \times & \times & \times \end{array}$	$\begin{array}{cccc} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{array}$	$\begin{array}{ccc} \times & & \\ \cdot & \cdot & \times \end{array}$	$\begin{array}{ccc} \times & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \times \end{array}$
LSUB2	7.42e-02	–	–	–	–	–	–
LSUB4	8.18e-02	1.63e-04	8.13e-04	1.07e-04	1.81e-04	5.72e-03	2.53e-03

Lösung konvergiert. Deshalb wird immer von dem bekannten Resultat [45] des einfachen quadratischen Gitters mit Néel-Modellzustand ( $J' = 1, \Phi = 0$ ) ausgegangen (s. auch Tab. 3.2), und die Parameter ( $J'$  bzw.  $\Phi$ ) in kleinen Schritten verändert, wobei immer die Lösung für den vorherigen Parameter als Startwert für den neuen Parameter verwendet wird.

Da die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen (s. Tab. 3.1) gleich der Anzahl der Ket-Gleichungen (3.25) ist, wächst der Aufwand diese Gleichungen zu lösen sehr stark für höhere LSUB $n$ -Approximationen.<sup>9</sup> Für den Néel-Modellzustand war es möglich die Rechnungen bis zum LSUB8-Level durchzuführen, wo 4986 gekoppelte nichtlineare Gleichungen zu lösen waren. Dagegen konnten für den helixartigen Zustand die Rechnungen nur bis LSUB6 (1638 gekoppelte Gleichungen) durchgeführt werden.

### Grundzustandsenergie

Mit dem Ket-Grundzustand kann nun die Grundzustandsenergie (3.7) berechnet werden. Dazu sind die Terme von (3.28) nötig, die keine Spinerzeugungsoperatoren enthalten, also

$$\begin{aligned} \langle \Phi | (\hat{\mathbf{s}}_k \hat{\mathbf{s}}_m)_\varphi | \Phi \rangle &= \frac{1}{2} \sin \varphi \left( -\frac{1}{2} F_k + \frac{1}{2} F_m \right) + \frac{1}{4} \cos \varphi + \frac{1}{4} (\cos \varphi - 1) (G_{km} + F_k F_m) \\ &= \frac{1}{2} \sin \varphi \left( -\frac{1}{2} [k] + \frac{1}{2} [m] \right) + \frac{1}{4} \cos \varphi + \frac{1}{4} (\cos \varphi - 1) (2[km] + [k][m]) \end{aligned}$$

Damit folgt für die Grundzustandsenergie (3.7) mittels Gl. (3.16)

$$E = \frac{N}{2} \sum_p (1 + \delta_{p,p,J'} (J' - 1)) \langle \Phi | (\hat{\mathbf{s}}_k \hat{\mathbf{s}}_m)_\varphi | \Phi \rangle |_{m=k+p}. \quad (3.29)$$

Die Grundzustandsenergie hängt also nur von den Korrelationskoeffizienten mit einem Spin ( $[k]$ ) und von denen mit zwei *benachbarten* Spins ( $[k, k+p]$ ) ab. Da (3.28) für den allgemeinen Ket-Korrelationsoperator (3.18) gilt, ist (3.29) ein *exakter* Ausdruck für jede Approximation von  $S$ . Die Gl. (3.29) ist also z.B. auch für alle LSUB $n$ -Approximationen identisch, der Wert der Korrelationskoeffizienten in ihr ist aber für

<sup>9</sup>Für das Newton-Raphson-Verfahren braucht man die Jacobi-Matrix des Gleichungssystems im Speicher des Rechners. Der Speicheraufwand dafür ist  $(N_F - \text{Anzahl der fundamentalen Konfigurationen}) 8 \times N_F \times N_F$  Bytes (also rund 200MByte für 5000 gekoppelte Gleichungen).

jede Approximation verschieden, und das gilt dann natürlich auch für die Energie nach (3.29) selbst. Zum Beispiel hängt die Grundzustandsenergie für das einfache quadratische Gitter ( $J' = 1$ ) mit Néel-Modellzustand nur von einem Korrelationskoeffizienten ( $\times \times$ ) ab, dessen Wert sich aber für die verschiedenen LSUB $n$ -Näherungen ändert (s. Tab. 3.2).

### 3.2.4 Der Bra-Grundzustand

#### Bra-Zustandsgleichungen

Um eine beliebige Grundzustandseigenschaft wie z.B. einen Ordnungsparameter zu bestimmen, benötigt man neben dem Ket- auch den Bra-Zustand, d.h. die Bra-Korrelationskoeffizienten. Um diese zu berechnen (mittels Gl. (3.10)) geht man von dem Erwartungswert des Hamiltonoperators aus:

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

Mit dem Korrelationsoperator für den Bra-Zustand (3.6), d.h. für Spinsysteme mit

$$\tilde{S} = 1 + \sum_l \sum_{i_1 \cdots i_l} [i_1 \cdots i_l] s_{i_1}^- \cdots s_{i_l}^- = 1 + \sum_{i_1} [\widetilde{i_1}] s_{i_1}^- + \sum_{i_1 i_2} [\widetilde{i_1 i_2}] s_{i_1}^- s_{i_2}^- + \cdots \quad (3.30)$$

und mit der Grundzustandsenergie  $E$  nach (3.7) folgt

$$\bar{H} = E + \sum_l \sum_{i_1 \cdots i_l} [i_1 \cdots i_l] \underbrace{\langle \Phi | s_{i_1}^- \cdots s_{i_l}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle}_{\text{Ket-Gl., =0 im Grundzustand}}, \quad (3.31)$$

d.h. wenn die Ket-Gleichungen (3.25) erfüllt sind, gilt natürlich  $\bar{H} = E$ . Die Summation über die  $i_1 \cdots i_l$  in (3.31) erfolgt über das ganze Gitter (ist also für das hier behandelte  $N \rightarrow \infty$  unendlich), d.h. auch in  $S$  nach (3.18) und in  $\tilde{S}$  nach (3.30) gibt es *unendlich* viele Terme. Das gilt auch bei Verwendung der LSUB $n$ -Näherung. Um nun (3.31) für die Berechnung der Bra-Koeffizienten verwenden zu können, muß der Zusammenhang zwischen der unendlichen Summe in den Korrelationsoperatoren und der Tatsache, daß in LSUB $n$  nur mit einer endlichen Anzahl von Korrelationskoeffizienten gerechnet wird, verdeutlicht werden [45].

In der LSUB $n$ -Approximation gibt es (s. Abschnitt 3.2.2) nur eine *endliche* Anzahl (mit  $N_F$  bezeichnet) von fundamentalen Konfigurationen, d.h. auch nur genau  $N_F$  *verschiedene* Korrelationskoeffizienten  $[i_1 \cdots i_l]$  und  $[\widetilde{i_1 \cdots i_l}]$  für den Ket- bzw. Bra-Zustand. Bezeichnen nun  $L_r$  bzw.  $\tilde{L}_r$  diese verschiedenen Korrelationskoeffizienten innerhalb der LSUB $n$ , die für jede der fundamentalen Konfigurationen (mit dem Index  $r$ ) nur genau einmal gezählt werden, so gibt es für jedes  $L_r$  (analog  $\tilde{L}_r$ ) insgesamt  $N\nu_r(n_r!)$  gleichartige Konfigurationen auf dem Gitter, die alle mit der entsprechenden (zu  $L_r$  gehörigen) fundamentalen Konfiguration in Zusammenhang stehen. Hierbei kommt der Faktor  $N$  (Anzahl Gitterplätze) von der Translationssymmetrie,  $\nu_r$  ist ein Faktor, der mit den Punktsymmetrien der  $r$ -ten fundamentalen Konfiguration zusammenhängt, und  $n_r$  ist die Anzahl der Spins in der Konfiguration (d.h. die Anzahl der Indizes  $i_1 \cdots i_l$  in den Korrelationskoeffizienten), so daß der Faktor  $n_r!$  von den

Vertauschungen der  $n_r$  Indizes kommt. Für die Koeffizienten in  $S$  (3.18) und in  $\tilde{S}$  (3.30) gilt also

$$\sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} [i_1 \dots i_l] = \sum_{r=1}^{N_F} N \nu_r (n_r!) L_r, \quad \sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} [i_1 \widetilde{\dots} i_l] = \sum_{r=1}^{N_F} N \nu_r (n_r!) \tilde{L}_r. \quad (3.32)$$

Es ist weiter sinnvoll die Notationen

$$x_r \equiv L_r, \quad \tilde{x}_r \equiv \nu_r (n_r!) \tilde{L}_r \quad (3.33)$$

einzuführen, dabei sind die  $x_r$  bzw.  $\tilde{x}_r$  die Korrelationskoeffizienten mit denen in den Computerprogrammen tatsächlich gerechnet wird. Für die Ket-Koeffizienten  $x_r$  wird das bei Betrachtung der Vorgehensweise zur Bestimmung der Ket-Gleichungen (s. Anhang A.2) klar; die Punktsymmetrien und Permutationen der Indizes führen zu Faktoren für die einzelnen Terme der Gleichungen, sind also nicht in den Korrelationskoeffizienten enthalten. Der Faktor  $N$  (Translationen) kann ohnehin nicht in den Lösungen der Ket-Gleichungen enthalten sein, da jede dieser Gleichungen stets mit einer einzelnen konkreten Konfiguration auf dem Gitter gebildet wird.<sup>10</sup>

Sei  $K_r(x_1, x_2, \dots) = 0$  die Ket-Gleichung für die  $r$ -te fundamentale Konfiguration (in Anhang A.2 wird beschrieben, wie man sie explizit bestimmt), so erhält man mit (3.33) für den Erwartungswert (3.31)

$$\bar{H} = E(x_1, x_2, \dots) + N \sum_{r=1}^{N_F} \tilde{x}_r K_r(x_1, x_2, \dots), \quad \Rightarrow \bar{H}' = E' + \sum_{r=1}^{N_F} \tilde{x}_r K_r, \quad (3.34)$$

wobei  $\bar{H}'$  und  $E'$  die entsprechenden spezifischen Größen (pro Gitterplatz) sind.  $E(x_1, x_2, \dots)$  ist explizit in Gl. (3.29) gegeben, und  $E'$  ist die Grundzustandsenergie pro Spin. Im Grundzustand, wo die Ket-Koeffizienten durch  $K_r(x_1, x_2, \dots) = 0$  bestimmt werden, gilt dann natürlich  $\bar{H}' = E'$ . Hier wird  $K_r(x_1, x_2, \dots)$  aber als eine Funktion der Ket-Koeffizienten betrachtet, und es ist  $K_r = \partial \bar{H}' / \partial \tilde{x}_r$  (wie es entsprechend der Definition der Ket-Gleichungen  $\partial \bar{H}' / \partial \tilde{x}_r = 0$  nach (3.9) sein sollte). Für die  $i$ -te Bra-Gleichung, die analog (s. Gl. (3.10)) durch  $\partial \bar{H}' / \partial x_i = 0$  bestimmt wird, folgt somit

$$\frac{\partial E'}{\partial x_i} + \sum_{r=1}^{N_F} \tilde{x}_r \frac{\partial K_r}{\partial x_i} = 0. \quad (3.35)$$

Diese  $N_F$  Gleichungen bilden zusammen ein *lineares* Gleichungssystem für die Bra-Koeffizienten  $\tilde{x}_r$  in Abhängigkeit von den  $x_r$ . Es kann nun z.B. mittels des Gaußschen Algorithmus gelöst werden, wenn die Ket-Koeffizienten  $x_r$  bekannt sind.

Mit dem auf diese Weise berechneten Bra-Grundzustand ist somit (zusammen mit dem Ket-Grundzustand) der Grundzustand des  $J$ - $J'$ -Modells (2.1) vollständig in LSUB $n$ -Näherung bestimmt.

---

<sup>10</sup>Man könnte von den  $N$  translationsinvarianten Konfigurationen  $N$  identische Ket-Gleichungen bilden, die dann natürlich alle zur gleichen Lösung führen würden.

## Magnetischer Ordnungsparameter

Um die magnetische Ordnung des Systems zu beschreiben, kann man einen einfachen Ordnungsparameter benutzen, welcher in den lokalen, rotierten Spinachsen (wo  $s_k^z|\Phi\rangle = -1/2|\Phi\rangle$  gilt) durch

$$m = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle \tilde{\Psi} | s_k^z | \Psi \rangle \quad (3.36)$$

definiert ist, also den Erwartungswert der Magnetisierung an einem Platz beschreibt. Für den Fall, daß der Néelzustand als CCM-Modellzustand verwendet wird, entspricht  $m$  der üblichen Untergitter-Magnetisierung („staggered“ Magnetisierung) eines Antiferromagneten. Der Ordnungsparameter ist ein Ausdruck für die Abweichung des Quantenzustandes vom klassischen Zustand, für den stets  $m = 1/2$  gilt. Für  $-\langle \tilde{\Psi} | s_k^z | \Psi \rangle$  in (3.36) folgt weiter (s. Gl. (A.2))

$$-\langle \tilde{\Psi} | s_k^z | \Psi \rangle = -\langle \Phi | \tilde{S} e^{-S} s_k^z e^S | \Phi \rangle = -\langle \Phi | \tilde{S} (s_k^z + F_k s_k^+) | \Phi \rangle = 1/2 - \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle.$$

Des Ausdruck  $\tilde{S} F_k s_k^+$  muß weiter untersucht werden. Mit (3.30) und (3.27) ergibt sich

$$\sum_k \tilde{S} F_k s_k^+ = \sum_k \sum_l \sum_{i_1 \dots i_l} [i_1 \dots i_l] s_{i_1}^- \dots s_{i_l}^- \sum_{l'} (l' + 1) \sum_{j_1 \dots j_{l'}} [k j_1 \dots j_{l'}] s_k^+ s_{j_1}^+ \dots s_{j_{l'}}^+. \quad (3.37)$$

Zum Erwartungswert von  $\sum_k \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle$  liefern nur die Terme einen Beitrag, in denen die Operatoren  $s^-$  und  $s^+$  in der gleichen Anzahl und mit den gleichen Indizes auftreten. Deshalb muß man in (3.37)  $l = l' + 1$  setzen und die  $l$  Indizes  $i_1, \dots, i_l$  müssen mit den Indizes  $k, j_1, \dots, j_{l-1}$  übereinstimmen. Dabei gibt es  $l!$  Möglichkeiten, entsprechend den möglichen Permutationen der  $i_1, \dots, i_l$  Indizes, und es folgt weiter

$$\sum_k \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle = \sum_k \sum_l l(l!) \sum_{i_1 \dots i_{l-1}} [k i_1 \dots i_{l-1}] [k i_1 \dots i_{l-1}].$$

Mit (3.32) und (3.33) folgt (Index  $k$  in  $i_l$  umbenannt)

$$\begin{aligned} \sum_k \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle &= \sum_l l(l!) \sum_{i_1 \dots i_l} [i_1 \dots i_l] [i_1 \dots i_l] = \sum_{r=1}^{N_F} n_r (n_r!) N \nu_r (n_r!) \tilde{L}_r L_r, \\ &\Rightarrow \sum_k \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle = \sum_{r=1}^{N_F} n_r (n_r!) N \tilde{x}_r x_r. \end{aligned}$$

Somit ergibt sich für den Ordnungsparameter  $m$  nach (3.36)

$$m = 1/2 - \frac{1}{N} \sum_k \langle \Phi | \tilde{S} F_k s_k^+ | \Phi \rangle = 1/2 - \sum_{r=1}^{N_F} n_r (n_r!) \tilde{x}_r x_r. \quad (3.38)$$

### 3.3 Der angeregte Zustand

In den bisherigen Abschnitten wurde die CCM zur Berechnung des Grundzustandes eines Systems verwendet. Hier wird die CCM für die näherungsweise Bestimmung von angeregten Zuständen benutzt, wobei in diesem Teil der Arbeit nur der *Néelzustand als CCM-Modellzustand* betrachtet wurde. Die dabei verwendeten Methoden und Algorithmen sind vielfach analog zu denen, die für die Bestimmung des Grundzustandes verwendet wurden, so daß vieles, was dort genauer beschrieben wurde, hier ebenso gültig ist.

#### Der Formalismus

Es wird der Formalismus von Emrich [61] verwendet, dessen Anwendung auf Spinsysteme in [39] und vor allem (für höhere Ordnungen) in [62] beschrieben wurde. Ausgangspunkt ist ein Operator  $X$ , der linear auf den Ket-Grundzustand  $|\Psi\rangle$  (nach (3.5)) angewendet wird, der angeregte Zustand  $|\Psi_e\rangle$  ist durch

$$|\Psi_e\rangle = X e^S |\Phi\rangle, \quad X = \sum_{I \neq 0} [I]_e C_I^+ = \sum_{i_1} [i_1]_e s_{i_1}^+ + \sum_{i_1 i_2} [i_1 i_2]_e s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ + \dots \quad (3.39)$$

bestimmt. Die Definition von  $X$  ist formal identisch mit der des Ket-Korrelationsoperators  $S$  nach (3.18), die  $[i_1 \dots i_l]_e$  sind die Korrelationskoeffizienten des angeregten Zustandes. Analog wie für  $S$  werden für  $X$  fundamentale Konfigurationen bestimmt, allerdings auf eine andere Weise (s. weiter unten), d.h. die fundamentalen Konfigurationen des angeregten Zustandes sind nicht mit denen des Grundzustandes (also mit denen von  $S$ ) identisch.

Unter Verwendung der Schrödingergleichung  $H|\Psi_e\rangle = E_e|\Psi_e\rangle$  erhält man wegen

$$\left. \begin{aligned} \cdot e^{-S} | \quad H X e^S |\Phi\rangle &= E_e X e^S |\Phi\rangle \\ \Rightarrow e^{-S} H X e^S |\Phi\rangle &= E_e X |\Phi\rangle \end{aligned} \right| \quad \left. \begin{aligned} \cdot e^{-S} X | \quad H e^S |\Phi\rangle &= E e^S |\Phi\rangle \\ \Rightarrow e^{-S} X H e^S |\Phi\rangle &= E X |\Phi\rangle \end{aligned} \right.$$

( $X$  und  $S$  vertauschen) für  $\epsilon_e = E_e - E$ , d.h. für die Differenz zwischen der Energie des angeregten Zustandes ( $E_e$ ) und der Grundzustandsenergie ( $E$ ),

$$\epsilon_e X |\Phi\rangle = e^{-S} [H, X]_- e^S |\Phi\rangle. \quad (3.40)$$

Darauf wird  $\langle \Phi | s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^-$  angewendet, wobei  $j_1 \dots j_l$  eine fundamentale Konfiguration des angeregten Zustandes ist,

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

und somit ist

$$(!) \epsilon_e [j_1 \dots j_l]_e = \langle \Phi | s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- e^{-S} [H, X]_- e^S |\Phi\rangle. \quad (3.41)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist linear in  $X$  und damit auch linear in den  $[i_1 \dots i_l]_e$ . Bezeichnet man die Konfiguration  $j_1 \dots j_l$  mit dem Index  $r$  und den dazugehörigen Koeffizienten des angeregten Zustandes mit  $x_{re}$  so kann man ( $N_{Fe}$  - Anzahl der fundamentalen Konfiguration des angeregten Zustandes)

$$\sum_{i=1}^{N_{Fe}} R_{ri} x_{ie} \equiv \langle \Phi | s_{j_1}^- \dots s_{j_l}^- e^{-S} [H, X]_- e^S |\Phi\rangle \quad (3.42)$$

schreiben, wobei die  $R_{ri}$  nicht von den  $x_{re}$ , sondern nur von den Ket-Korrelationskoeffizienten des Grundzustandes abhängen. Somit läßt sich für (3.41)

$$\epsilon_e(n_r!)x_{re} = \sum_{i=1}^{N_{Fe}} R_{ri}x_{ie} \quad (3.43)$$

schreiben. Das ist eine Eigenwertgleichung für die Eigenwerte  $\epsilon_e$  mit den dazugehörigen Eigenvektoren  $\{x_{ie}\}$ .

### Approximationsschema

Genauso wie im Falle des Grundzustandes (für  $S$ ) muß man auch für den Operator  $X$  nach Gl. (3.39) ein Approximationsschema benutzen. Dabei wird für den angeregten Zustand die gleiche Näherung wie für den Grundzustand verwendet.<sup>11</sup>

Im weiteren interessieren nur die *niedrigsten* Anregungen. Die fundamentalen Konfigurationen für die LSUB $n$  werden genau wie vorher (für den Grundzustand bei Verwendung des Néel-Modellzustandes) definiert, es werden jetzt aber nur genau die Konfigurationen genommen, welche die  $z$ -Komponente des totalen Spins ( $s_T^z$ ) in bezug auf den Modellzustand um  $\pm 1$  ändern<sup>12</sup> [62]. Mußte im Falle des Grundzustandes die Anzahl der Spins, die zum Untergitter A bzw. B gehören für eine Konfiguration gleich sein, so muß hier diese Anzahl für A und B gerade um genau eins differieren. Man erhält spinwellenartige Anregungen mit nur einem Magnon, und genau diese Form haben auch die niedrigsten Anregungen, so daß keine weiteren Konfigurationen (also solche, die  $s_T^z$  um  $\pm 2$  oder mehr ändern) in  $X$  berücksichtigt werden müssen. Die Anzahl dieser fundamentalen Konfigurationen für den angeregten Zustand für LSUB $n$  ist in Tab. 3.1 im Abschnitt 3.2.2 angegeben.

### Aufstellen und Lösen der Eigenwertgleichung

Die Berechnung der  $R_{ri}$  (Gl. (3.42)) erfolgt analog wie die Berechnung der Koeffizienten der Ket-Gleichungen (Gl. (3.25), s. Anhang A.2), der einzige Unterschied ist, daß hier  $[H, X]_-$  anstelle von  $H$  in den Ausdrücken auftritt. Zunächst wird also  $e^{-S}[H, X]_-e^S|\Phi\rangle$  so umgeformt, daß es nur noch Spinerzeugungsoperatoren enthält [62]. Analog zu (3.27) für die Ket-Gleichungen wird hier

$$\begin{aligned} P_k &\equiv \sum_l (l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [ki_1 \dots i_l]_e s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ = [k]_e + 2 \sum_i [ki]_e s_i^+ + \dots \\ Q_{km} &\equiv \sum_l (l+2)(l+1) \sum_{i_1 \dots i_l} [kmi_1 \dots i_l]_e s_{i_1}^+ \dots s_{i_l}^+ = 2[km]_e + 6 \sum_i [kmi]_e s_i^+ + \dots \end{aligned} \quad (3.44)$$

definiert, so daß für die einzelnen Terme von  $H$  bei Verwendung des Néelzustandes

---

<sup>11</sup>Das ist nicht notwendig [62], wird aber so gemacht, um die CCM-Rechnungen so systematisch und selbstkonsistent wie möglich durchführen zu können.

<sup>12</sup>Dabei wurden die Konfigurationen, die eine Änderung von  $s_T^z$  von  $+1$  bewirken explizit mit denen gleich gesetzt, die eine Änderung von  $s_T^z$  von  $-1$  bewirken. Das ist deshalb möglich, da beide Arten von Konfigurationen aufgrund der Spiegelsymmetrie an der  $y$ -Achse zwischen zwei Gitterpunkten ( $x \rightarrow -(x+1)$ ,  $y \rightarrow y$ ; s. (3.23)), also einer Punktsymmetrie des Hamiltonoperators, äquivalent sind.

als CCM-Modellzustand, d.h. für die Terme in (3.15)

$$\begin{aligned}
e^{-S}[s_k^- s_m^-, X]_- e^S |\Phi\rangle &= [(4F_k F_m Q_{km} + 4G_{km} Q_{km} + 2F_k^2 P_m F_m + 2P_k F_k F_m^2 \\
&\quad + 4P_k F_m G_{km} + 4F_k P_m G_{km}) s_k^+ s_m^+ \\
&\quad - (2F_k Q_{km} + 2P_k G_{km} + F_k^2 P_m + 2P_k F_k F_m) s_k^+ \\
&\quad - (2Q_{km} F_m + 2G_{km} P_m + P_k F_m^2 + 2F_k F_m P_m) s_m^+ \\
&\quad + Q_{km} + F_k P_m + P_k F_m] |\Phi\rangle \\
e^{-S}[s_k^+ s_m^+, X]_- e^S |\Phi\rangle &= 0 \\
e^{-S}[s_k^z s_m^z, X]_- e^S |\Phi\rangle &= [(Q_{km} + F_k P_m + P_k F_m) s_k^+ s_m^+ - \frac{1}{2} P_k s_k^+ - \frac{1}{2} P_m s_m^+] |\Phi\rangle
\end{aligned} \tag{3.45}$$

gilt.

Als nächstes werden, wieder analog zu den Ket-Gleichungen, alle die Terme in  $e^{-S}[H, X]_- e^S |\Phi\rangle$  ausgewählt, deren Indizes der  $s^+$ -Operatoren genau mit den Indizes  $j_1 \cdots j_l$  der  $s^-$ -Operatoren (s. Gl (3.42)) übereinstimmen, auf diese Weise lassen sich die einzelnen Elemente der Matrix  $R_{ri}$  bestimmen. Dabei wird derselbe Algorithmus verwendet, wie er im Falle der Ket-Gleichungen im Anhang A.2 beschrieben wurde.<sup>13</sup>

Die  $R_{ri}$  hängen von den Korrelationskoeffizienten des Ket-Grundzustandes ab, nachdem also diese bestimmt sind, kann die Eigenwertgleichung (3.43) (numerisch) gelöst werden. Um die Differenz zwischen Grundzustand und niedrigster Anregung (d.h. das Energieanregungs-Gap  $\Delta$ ) zu berechnen, wird der *kleinste* Eigenwert von Gl. (3.43) ausgewählt. Es ist zu beachten, daß die Eigenwerte der Gl. (3.43) nicht reell sein müssen, da die Matrix  $R_{ri}$  nicht symmetrisch ist. Im gesamten betrachteten Bereich ist das so bestimmte  $\Delta$  aber reell. Diese Berechnungen für den angeregten Zustand werden bis zur LSUB6-Approximation durchgeführt.

### 3.4 Extrapolation der CCM-LSUB $n$ -Resultate

Bis heute gibt es keine Theorie wie die einzelnen LSUB $n$ -Resultate mit  $n$  skalieren. Es gibt aber für die verschiedenen physikalischen Größen (Energie, Magnetisierung, Energie-Gap) empirische Anzeichen [40, 43, 45, 62] für solche Skalierungsgesetze.

Diese Skalierungsgesetze werden u.a. dadurch begründet, daß sie die Resultate für die verschiedenen LSUB $n$  gut fitten, d.h. die mittlere quadratische Abweichung zwischen der extrapolierten Kurve und den einzelnen Resultaten ist klein. Ein weiterer Grund ist, daß die extrapolierten Resultate (also der Wert des Fits bei  $n \rightarrow \infty$ ) mit den Resultaten anderer Methoden gut übereinstimmen (z.B. mit der Green-Funktionen-Monte-Carlo-Methode und mit der Reihenentwicklung für das 2D  $XXZ$ -Modell [40, 45]). Für das 1D  $XY$ -Modell zeigen die extrapolierten CCM-Resultate eine gute Übereinstimmung mit den exakten Resultaten dieses Modells (s. Abschnitt 3.6).

---

<sup>13</sup>Die Terme der Ket-Gleichungen und die Elemente von  $R_{ri}$  werden mit ein und derselben Prozedur im CCM-Computerprogrammpaket berechnet.

In Übereinstimmung mit diesen vorherigen Resultaten werden hier die folgenden Skalierungsgesetze verwendet: für die Grundzustandsenergie (3.29)

$$E = a_0 + a_1(1/n^2) + a_2(1/n^2)^2, \quad (3.46)$$

für die Magnetisierung im Grundzustand (3.38)

$$m = b_0 + b_1(1/n) + b_2(1/n)^2 \quad (3.47)$$

und für das Gap zu den niedrigsten Anregungen (3.43)

$$\Delta = c_0 + c_1(1/n) + c_2(1/n)^2. \quad (3.48)$$

Hierbei ist  $n$  die Ordnung der LSUB $n$ -Näherung.

### 3.5 Wahl des CCM-Modellzustandes

Wie bereits im Unterabschnitt 3.2.1 dargelegt wurde, wird für das  $J$ - $J'$ -Modell (2.1) der helixartige Zustand (2.8) mit dem charakteristischen Winkel  $\Phi$  (s. auch Abb. 2.2), als CCM-Modellzustand verwendet. Es muß nun noch ein zweckmäßiger Wert für den Winkel  $\Phi$  ausgewählt werden. Eine Möglichkeit wäre der klassische Grundzustand des Modells (2.1), also  $\Phi = \Phi_{\text{cl}}$  nach Gl. (2.7).

Eine andere Möglichkeit ist, eine CCM-LSUB $n$ -Approximation mit dem Winkel  $\Phi$  als Parameter durchzuführen, und dann die dazugehörige LSUB $n$ -Näherung der Energie in Bezug auf den Winkel  $\Phi$  zu minimieren, also

$$E_{\text{LSUB}n}(\Phi) \rightarrow \min \quad \Leftrightarrow \quad \Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}. \quad (3.49)$$

Die Resultate für  $\Phi_{\text{LSUB}n}$  werden später beschrieben (Abb. 5.7 im Kapitel 5).

Es ist nun aber zu beachten, daß (wie im Abschnitt 3.1 dargelegt) die CCM keine strenge obere Grenze für die Grundzustandsenergie liefert. Die Verwendung der CCM mit einem variationellen Parameter (also hier die Verwendung von  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$ ) zeigte sich jedoch in [41] als eine sinnvolle Annahme, welche vernünftige Ergebnisse lieferte. Es werden im folgenden weitere Argumente gegeben, die vermuten lassen, daß  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$  tatsächlich eine bessere Wahl als  $\Phi = \Phi_{\text{cl}}$  ist.

Als erstes zeigt sich, daß man bei Verwendung von  $\Phi = \Phi_{\text{cl}}$  im Bereich  $-0.7 \lesssim J' \lesssim -0.47$  keine Lösungen für die Ket-Gleichungen der LSUB6 finden kann, d.h. die Newton-Raphson-Methode, die man verwendet um die Lösungen dieser Gleichungen zu finden, konvergiert dort nicht. Das ist ein klares Anzeichen dafür, daß dieser Modellzustand nicht besonders geeignet ist. Im Gegensatz dazu wird solches Verhalten für  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$  nicht gefunden.

Es ist zweitens allgemein bekannt, daß Quantenfluktuationen collineare Ordnung (wie z.B. die Néelordnung) bevorzugen [13, 92]. In der Tat zeigt sich (s. unten, Abb. 5.7), daß die Néelordnung ( $\Phi = 0$ ) auch für gewisse Werte  $J' < -1/3$  weiter zu existieren scheint, wo sie im klassischen Fall bereits zusammengebrochen ist. Das

steht in Übereinstimmung mit Resultaten der exakten Diagonalisierung des Modells (s. Abb. 5.5 weiter unten).

Drittens findet man, daß die CCM-Resultate der Grundzustandsenergie bei Verwendung des helixartigen Modellzustandes (also  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$ ) besser mit den Resultaten der exakten Diagonalisierung übereinstimmen, als bei Verwendung von  $\Phi = \Phi_{\text{cl}}$ . Es ist dabei zu beachten, daß die CCM-Resultate für die Grundzustandsenergie im allgemeinen gut mit den entsprechenden Resultaten der exakten Diagonalisierung übereinstimmen [45], wenn ein guter CCM-Modellzustand gewählt wurde.

Aus all diesen Gründen wird der helixartige Zustand mit  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$  überall in dieser Arbeit als der CCM-Modellzustand für den Hamiltonoperator (2.1) benutzt. Es ist zu beachten, daß dieser Modellzustand für  $J' \geq -1/3$  mit dem klassischen Grundzustand von Gl. (2.1) übereinstimmt, was dagegen für  $J' < -1/3$  nicht der Fall ist.

### 3.6 Test der Methode am XY-Modell

Um eine Vorstellung von der Brauchbarkeit und Genauigkeit der CCM bei Anwendung auf Quantenspinsysteme zu bekommen, wird die Methode auf das anisotrope XY-Modell angewendet. Dieses Modell wird durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2} \sum_{l,p} [(1 + \gamma) s_l^x s_{l+p}^x + (1 - \gamma) s_l^y s_{l+p}^y] \quad (3.50)$$

beschrieben, wobei für den Anisotropieparameter  $-1 \leq \gamma \leq 1$  gilt. Die Summation über  $l$  erfolgt über alle  $N$  Gitterplätze, die Summation über  $p$  umfaßt alle nächsten Nachbarn.

Mittels der CCM in verschiedenen Näherungen wird der ein- und zweidimensionale Fall (in 2D quadratisches Gitter) für Spin  $s = 1/2$  behandelt. Die Ergebnisse dieses Abschnittes sind in [43] veröffentlicht, wo zusätzlich (nur in SUB2) auch angeregte Zustände und der allgemeinere Fall  $s \geq 1/2$  behandelt werden.

Für den eindimensionalen Fall mit  $s = 1/2$  wurde das Modell (3.50) von Lieb 1961 exakt gelöst [63]. Somit gibt es die Möglichkeit die Ergebnisse der CCM mit diesen exakten Resultaten zu vergleichen. Für höhere Spins, bzw. für höhere Dimensionen gibt es Resultate unter Verwendung der Spinwellentheorie [68], Monte-Carlo-Berechnungen [65, 67], Reihenentwicklung [66], und für  $\gamma = 0$  Resultate mittels exakter Diagonalisierung [64].

#### CCM-Modellzustand

Man kann erwarten, daß die Spins im Grundzustand von (3.50) in der  $xy$ -Ebene liegen. Deshalb wird als CCM-Modellzustand  $|\Phi\rangle$  ein Néelzustand gewählt, in dem die Spins parallel bzw. antiparallel zur  $x$ -Achse liegen<sup>14</sup>. Dieser Modellzustand ist der korrekte Grundzustand von (3.50) für  $\gamma = 1$  (Ising-Modell). Es werden nun lokale Koordinatentransformationen durchgeführt, so daß jeder Spin in  $|\Phi\rangle$  in die negative

<sup>14</sup>Ein solcher Modellzustand wurde auch erfolgreich für das  $XXZ$ -Modell verwendet [42].

$z$ -Richtung zeigt. Je nachdem, ob die Spins ursprünglich in die negative oder positive  $x$ -Richtung zeigten, gilt

$$\begin{aligned} s^x &\rightarrow -s^z, s^y \rightarrow s^y, s^z \rightarrow s^x && \text{ursprünglich } -x \\ s^x &\rightarrow s^z, s^y \rightarrow s^y, s^z \rightarrow -s^x && \text{ursprünglich } +x. \end{aligned}$$

Mit dieser Transformation folgt aus (3.50)

$$H = \frac{1}{2} \sum_{l,p} [A s_l^z s_{l+p}^z + B (s_l^+ s_{l+p}^+ + s_l^- s_{l+p}^-) + C (s_l^+ s_{l+p}^- + s_l^- s_{l+p}^+)] \quad (3.51)$$

$$\text{mit } A \equiv -(1 + \gamma), \quad B \equiv -\frac{1}{4}(1 - \gamma), \quad C = -B.$$

### Ket-Grundzustand

Neben der LSUB $n$ -Näherung (s. weiter unten) wird die SUB2-Näherung verwendet (s. auch Abschnitt 3.2.2). Der Korrelationsoperator ist für die SUB2-Näherung durch

$$S = \sum_{l=1}^N \left( \frac{1}{2} \sum_{r \neq 0} b_r s_l^+ s_{l+r}^+ \right) \quad (3.52)$$

gegeben, die Summation über  $r$  erfolgt über alle verschiedenen Gittervektoren (mit  $r \neq 0$ ). Da die volle SUB4-Approximation zu kompliziert ist, gibt es die Möglichkeit nur ihre wichtigsten Zusatzterme zu berücksichtigen. Das sind die Terme mit vier Spins auf benachbarten Plätzen. Damit erhält man das SUB2+LSUB4-Schema, das nur im eindimensionalen Fall verwendet wurde, dort gilt dann

$$S = \sum_{l=1}^N \left( \frac{1}{2} \sum_{r \neq 0} b_r s_l^+ s_{l+r}^+ + g_4 s_l^+ s_{l+1}^+ s_{l+2}^+ s_{l+3}^+ \right). \quad (3.53)$$

Mit diesem Schema erhält man mit Gl. (3.51) die Ket-Gleichungen für die Koeffizienten  $b_r$  und  $g_4$

$$\begin{aligned} \langle \Phi | s_l^- s_{l+r}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle &= \sum_p \left[ B \sum_{r'} b_{r'} b_{r-r'+p} - (A + 4Bb_1) b_r \right. \\ &\quad \left. + 2Cb_{r-p} + (B(2b_1^2 + 2g_4 + 1) + Ab_1) \delta_{p,r} + Bg_4 \delta_{3p,r} \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi | s_l^- s_{l+1}^- s_{l+2}^- s_{l+3}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle &= A(b_1^2 + 3b_2^2 + 2b_1 b_3) - 4B(b_1 b_2 b_4 + b_1 b_3^2 + b_2^2 b_3) \\ &\quad - 4C(2b_1 b_2 + b_2 b_3) + g_4 [B(2b_5 - 2b_3 - 8b_1) - A] = 0. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Die entsprechenden Gleichungen für die SUB2-Näherung entstehen einfach dadurch, daß man in der ersten Gleichung (3.54) überall  $g_4 = 0$  setzt, und die zweite Gleichung (3.55) wegläßt.

Um diese gekoppelten nichtlinearen Gleichungen zu lösen, wird zunächst Gl. (3.54) fouriertransformiert und dann die resultierenden Gleichungen und Gl. (3.55) selbstkonsistent gelöst. Für die Dimension  $d$  erhält man

$$\Gamma(q) \equiv \sum_r e^{irq} b_r, \quad b_r = \int_{-\pi}^{\pi} d^d q (2\pi)^{-d} e^{-irq} \Gamma(q), \quad \gamma(q) = \frac{1}{z} \sum_p e^{ipq},$$

$$b_1 = \int_{-\pi}^{\pi} d^d q (2\pi)^{-d} \gamma(q) \Gamma(q), \quad X_1 \equiv \sum_r b_r b_{r+p} = \int_{-\pi}^{\pi} d^d q (2\pi)^{-d} \gamma(q) \Gamma^2(q),$$

was dann für Gl. (3.54) zu

$$a\Gamma^2(q) + b\Gamma(q) + c = 0$$

führt, dabei sind

$$\begin{aligned} a &\equiv B\gamma(q), & b &\equiv -A - 4Bb_1 + 2C\gamma(q), \\ c &\equiv [B(2b_1^2 + 2g_4 + 1) + Ab_1]\gamma(q) + Bg_4\gamma(3q) - BX_1 - 2Cb_1 \end{aligned}$$

mit der üblichen Lösung

$$\Gamma(q) = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Für die Grundzustandsenergie gilt dann

$$E = \langle \Phi | e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = \frac{1}{2} z N \left( \frac{1}{4} A + b_1 B \right). \quad (3.56)$$

### Bra-Grundzustand

Der Bra-Korrelationsoperator ist für die SUB2+LSUB4-Näherung durch

$$\tilde{S} = 1 + \sum_{l=1}^N \left( \frac{1}{2} \sum_r \tilde{b}_r s_l^- s_{l+r}^- + \tilde{g}_4 s_l^- s_{l+1}^- s_{l+2}^- s_{l+3}^- \right) \quad (3.57)$$

gegeben. Mit  $\bar{H} = \langle \tilde{\Psi} | H | \Psi \rangle$  folgt für die Bra-Zustandsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{H}}{\partial b_r} &= N \sum_p \left[ 2B \sum_{r'} \tilde{b}_{r'} b_{r'-r+p} - (A + 4Bb_1) \tilde{b}_r + 2C \tilde{b}_{r-p} \right. \\ &\quad \left. + (B + (A + 4Bb_1) \tilde{b}_1 - 4B \sum_{r'} \tilde{b}_{r'} b_{r'}) \delta_{p,r} \right. \\ &\quad \left. + \tilde{g}_4 / 2 \{ [4A(b_1 + b_3) - 8B(b_2 b_4 + b_3^2) - 16Bg_4 - 16Cb_2] \delta_{p,r} \right. \\ &\quad \left. + [12Ab_2 - 8B(b_1 b_4 + 2b_2 b_3) - 8C(2b_1 + b_3)] \delta_{2p,r} \right. \\ &\quad \left. + [4Ab_1 - 8B(2b_1 b_3 + b_2^2) - 4Bg_4 - 8Cb_2] \delta_{3p,r} \right. \\ &\quad \left. - 8Bb_1 b_2 \delta_{4p,r} + 4Bg_4 \delta_{5p,r} \right] = 0, \quad (3.58) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial g_4} = N \left[ B(2\tilde{b}_1 + \tilde{b}_3) + \tilde{g}_4(2B(b_5 - b_3 - 4b_1) - A) \right] = 0. \quad (3.59)$$

Analog wie für den Ket-Zustand wird für die Gleichung (3.58) eine Fouriertransformation durchgeführt und die resultierenden Gleichungen werden zusammen mit Gl. (3.59) gelöst, wodurch man die Korrelationskoeffizienten  $\tilde{b}_r$  und  $\tilde{g}_4$  des Bra-Zustandes erhält.

Damit erhält man für die Untergitter-Magnetisierung

$$M = -2 \langle \tilde{\Psi} | s_l^z | \Psi \rangle = 1 - 2 \sum_r \tilde{b}_r b_r - 8g_4 \tilde{g}_4.$$

Tabelle 3.3: Grundzustandsenergie und Untergitter-Magnetisierung des eindimensionalen  $XY$ -Modells für  $\gamma = 0$  im Vergleich zu den exakten Resultaten [63].  $N_F$  gibt die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für eine gegebenen  $LSUBn$ -Näherung an.

Näherung	$N_F$	$E/N$	$M$
LSUB2	1	-0.303813	0.837286
SUB2	-	-0.310377	0.779517
LSUB4	4	-0.314083	0.722916
SUB2+LSUB4	-	-0.314699	0.625904
LSUB6	13	-0.316301	0.660064
LSUB8	43	-0.317137	0.617624
LSUB10	151	-0.317542	0.586067
extrap. $LSUBn$	-	-0.31829	0.47
exakt	-	-0.318310	0.0

### Bemerkungen zur $LSUBn$ -Näherung

Die  $LSUBn$ -Näherung erfolgt auf die gleiche Art und Weise wie in den Abschnitten 3.2.2 bis 3.2.4 beschrieben. Es ist zu beachten, daß  $s_T^z$  keine Erhaltungsgröße ist, da es nicht mit dem Hamiltonoperator (3.50) vertauscht (Außerdem ist  $s_T^z$  auch kein Eigenzustand des Modellzustandes.). Da jedoch der Hamiltonoperator (3.51) nur solche Produkte mit zwei Spinoperatoren enthält, die den Modellzustand  $|\Phi\rangle$  entweder unverändert lassen ( $s_i^z s_{i+p}^z$ ), oder genau *zwei* Spins in ihm flippen, kann der Grundzustand nur eine *gerade* Anzahl von bezüglich des Modellzustandes gedrehten Spins enthalten. Deshalb kann man die  $LSUBn$ -Näherung auf die Konfigurationen beschränken, die eine gerade Anzahl von Spinerzeugungsoperatoren enthalten.<sup>15</sup> Die einzelnen  $LSUBn$ -Resultate werden, wie im Abschnitt 3.4 beschrieben, extrapoliert.

### Resultate

Für den *eindimensionalen Fall* lassen sich die CCM-Resultate direkt mit der exakten Lösung<sup>16</sup> des Modells vergleichen.

Für den Bereich  $\gamma < 0$  ist beim Vergleich generell zu beachten, daß der CCM-Modellzustand (Néelzustand in  $x$ -Richtung) nur für  $\gamma = 1$  exakt ist. Dagegen ist

<sup>15</sup>Das gilt auch für das  $J$ - $J'$ -Modell (2.1) mit Néel-Modellzustand, aber nur dort kann man desweiteren fordern, daß in den Konfigurationen die Anzahl der in den beide Untergittern erzeugten Spins gleich ist. Da das hier nicht gilt, sind zusätzliche Konfigurationen zu berücksichtigen.

<sup>16</sup>Die exakten Resultate der Grundzustandsenergie bzw. der Untergitter-Magnetisierung für das 1D  $XY$ -Modell (3.50) sind [63]

$$E/N = -\frac{1}{2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{\cos^2(k) + \gamma^2 \sin^2(k)} dk, \quad M = \sqrt{2 \frac{\sqrt{|\gamma|}}{1 + |\gamma|}}.$$

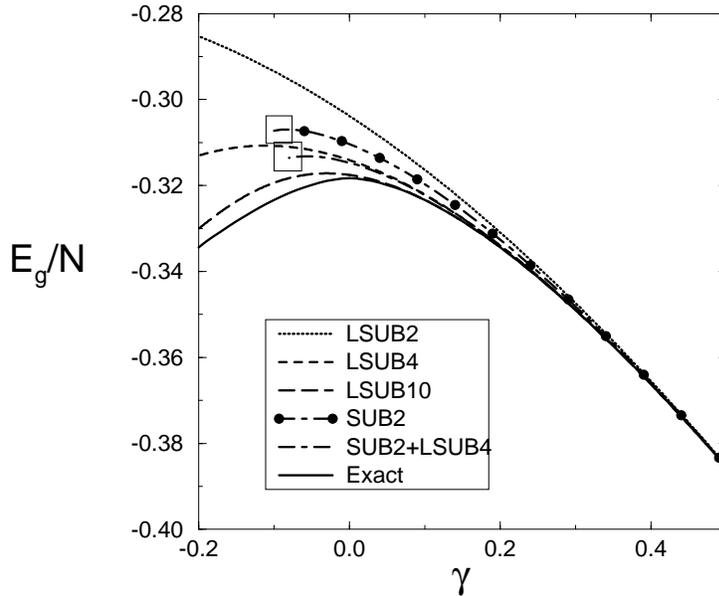


Abbildung 3.1: CCM-Resultate und das exakte Resultat der Grundzustandsenergie des eindimensionalen XY-Modells. Die Endpunkte der Konvergenz der SUB2- und SUB2+LSUB4-Näherungen sind gekennzeichnet.

der Hamiltonoperator (3.50) selbst, und damit seine exakte Lösung symmetrisch um  $\gamma = 0$ , und es gibt die zwei Ising-Fälle bei  $\gamma = \pm 1$ . Für  $\gamma < 0$  entfernt man sich also immer weiter von dem CCM-Modellzustand, und spätestens bei  $\gamma = -1$  ist der exakte Grundzustand (Néelzustand in  $y$ -Richtung) schließlich orthogonal zum Modellzustand, und die CCM kann nicht mehr funktionieren. Das kann innerhalb der CCM auch zum Auftreten von *Endpunkten der Konvergenz* führen (in der Abb. 3.1 durch kleine Quadrate gekennzeichnet). Ab diesen Punkten findet man keine Lösungen der Ket-Gleichungen mehr, d.h. das Newton-Verfahren, das zur Lösung der Gleichungen benutzt wird, konvergiert nicht mehr. Endpunkte der Konvergenz sind Anzeichen für Phasenübergänge im System [45], und sie bedeuten, daß der verwendete CCM-Modellzustand durch einen besseren ersetzt werden muß. In diesem Fall wäre das natürlich der Néelzustand in  $y$ -Richtung.

Die Grundzustandsenergie (s. Abb. 3.1) zeigt für den eindimensionalen Fall im gesamten Parameterbereich eine gute bis sehr gute (bei höheren CCM-Näherungen) Übereinstimmung mit dem exakten Resultat. Insbesondere das extrapolierte LSUB $n$ -Resultat stimmt auch noch für  $\gamma = 0$  (s. Tab. 3.3) außerordentlich gut mit dem exakten Ergebnis überein. Das zeigt, wie gut der Extrapolationsansatz der Energie (3.46) hier geeignet ist.

Für  $\gamma \gtrsim 0.2$  zeigen auch die Ergebnisse für die Untergitter-Magnetisierung in 1D (s. Abb. 3.2) eine sehr gute Übereinstimmung mit den exakten Resultaten. Dieser Vergleich fällt bei  $\gamma \approx 0$  (s. auch Tab. 3.3) schlecht aus. Das Versagen der CCM an dieser Stelle soll nun näher untersucht werden.

Bei  $\gamma = 0$  verschwinden die langreichweitigen Korrelationen, und die Untergitter-

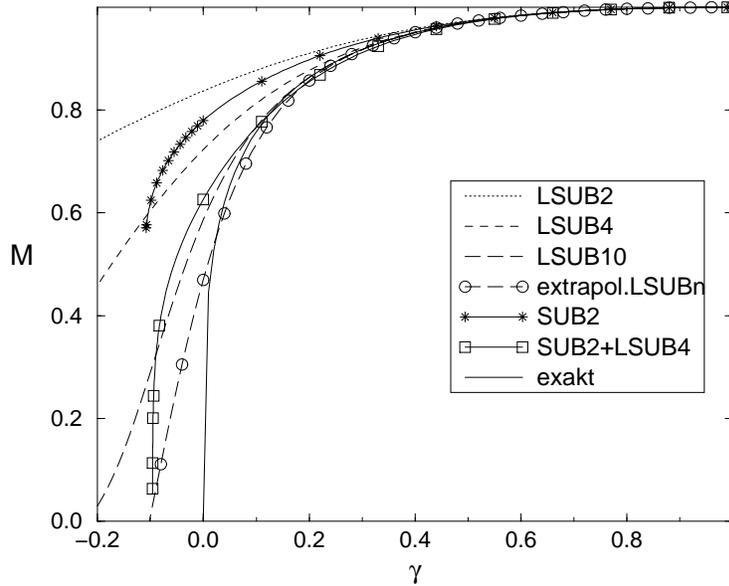


Abbildung 3.2: CCM-Resultate und exaktes Resultat der Untergitter-Magnetisierung des eindimensionalen XY-Modells.

Magnetisierung wird Null. Die exakte Lösung zeigt [63], daß die Korrelationsfunktion  $\langle \mathbf{s}_0^x \mathbf{s}_r^x \rangle$  (die hier die langreichweitige Ordnung beschreibt) bei  $\gamma = 0$  nur nach einem Potenzgesetz (konkret  $\langle \mathbf{s}_0^x \mathbf{s}_r^x \rangle \propto r^{-1/2}$ ) mit dem Abstand  $r$  gegen Null geht. Für  $\gamma \neq 0$  konvergiert die Korrelationsfunktion dagegen exponentiell für große Abstände  $r$ . Das könnte der Grund dafür sein, daß die CCM-Ergebnisse für  $\gamma \approx 0$  so deutlich schlechter als in den anderen Bereichen sind. Zwar ist grundsätzlich zu erwarten, daß die CCM, die von einem geordneten Zustand (Néelzustand mit  $M = 1$ ) ausgeht, einen Quantenzustand mit geringerer magnetischer Ordnung nicht so gut beschreiben kann wie einen Zustand, dessen Ordnung nur geringförmig von der Ordnung des Modellzustandes abweicht. Der entscheidende Grund für das Versagen der CCM bei  $\gamma = 0$  dürfte jedoch in dem langsamen *nicht*exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion zu suchen sein. Das zeigen auch die Resultate für das  $J$ - $J'$ -Modell (s. Kapitel 5 unten) für die dimerisierte Phase. Hier gibt es eine exponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion mit dem Abstand, und die CCM liefert gute Ergebnisse, d.h. sie zeigt (im Gegensatz zur Situation hier) das Verschwinden der langreichweitigen Ordnung.

Es ist zu beachten, daß der mittlere quadratische Fehler der CCM-Extrapolation für die Magnetisierung auch bei  $\gamma = 0$  noch recht gering ist ( $\approx 10^{-5}$ ), obwohl er generell für kleinere Werte von  $\gamma$  um viele Größenordnungen ansteigt (vgl. z.B.  $\gamma > 0.9$ , Fehler:  $< 10^{-15}$ ;  $\gamma = 0.5$ , Fehler:  $\approx 10^{-9}$ ).

Der Phasenübergang, der sich exakt bei  $\gamma = 0$  befindet, verschiebt sich mit SUB2+LSUB4 und mit dem extrapolierten LSUBn-Ergebnis nur recht geringfügig ( $\gamma \approx -0.1$ ) zu negativen Werten.

Für den *zweidimensionalen Fall* (quadratisches Gitter) zeigen die CCM-Resultate auch noch für den Fall  $\gamma = 0$  (s. Tab. 3.4) eine gute Übereinstimmung mit den

Tabelle 3.4: Grundzustandsenergie und Untergitter-Magnetisierung des  $XY$ -Modells auf dem quadratischen Gitter für  $\gamma = 0$  im Vergleich zu Resultaten der Reihenentwicklung [66].  $N_F$  gibt die Anzahl der fundamentalen Konfigurationen für eine gegebenen  $LSUBn$ -Näherung an.

Näherung	$N_F$	$E/N$	$M$
LSUB2	1	-0.540312	0.949634
SUB2	-	-0.546325	0.918953
LSUB4	10	-0.547267	0.915768
LSUB6	131	-0.548329	0.901357
LSUB8	2793	-0.548616	0.893665
extrap. $LSUBn$	-	-0.54892	0.869
Reihenentwicklung	-	-0.5488	0.872

Resultaten der Reihenentwicklung [66]. Diese Aussage gilt sowohl für die Energie, als auch in leicht abgeschwächter Form für die Magnetisierung.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die CCM insgesamt gut bis sehr gut zur Beschreibung des  $XY$ -Modells geeignet ist, und die CCM-Extrapolationsgesetze für die Energie und die Magnetisierung aus dem Abschnitt 3.4 genaue Ergebnisse liefern und die einzelnen  $LSUBn$ -Resultate gut fitten. Allerdings versagt die CCM bei der Beschreibung des Ordnungsverhaltens im eindimensionalen Fall bei  $\gamma \approx 0$ . Dieser Bereich ist durch einen langsamen, nichtexponentiellen Abfall der Korrelationsfunktion gekennzeichnet. Die CCM überschätzt hier die langreichweitige Ordnung.

# Kapitel 4

## Spinwellentheorie und andere Methoden

Nach der CCM im vorigen Kapitel werden in diesem Kapitel weitere Methoden auf das  $J$ - $J'$ -Modell mit dem Hamiltonoperator (2.1) angewendet. Im Mittelpunkt steht dabei die Spinwellentheorie, welche in verschiedenen Ordnungen und mit verschiedenen Modellzuständen verwendet wird (Abschnitte 4.1 bis 4.3). Desweiteren wird eine einfache Variationsrechnung benutzt (Abschnitt 4.4) und für kleine Systeme eine exakte Diagonalisierung (Abschnitt 4.5) durchgeführt. Alle diese Betrachtungen dienen der näherungsweisen Bestimmung des *Grundzustandes* des  $J$ - $J'$ -Modells, mittels der exakten Diagonalisierung und der dimerisierten Spinwellentheorie wird außerdem auch noch das Energie-Gap bestimmt. Einige wichtige Ergebnisse dieses Kapitels wurden in zwei Veröffentlichungen [52, 53] präsentiert.

### 4.1 Lineare Spinwellentheorie

#### Einführende Bemerkungen zur Spinwellentheorie

In der Spinwellentheorie (SWT) [72, 73, 75] werden die Spinoperatoren ( $s^z$ ,  $s^\pm = s^x \pm is^y$ ) durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ( $a^+$  bzw.  $a$ ) von Bosonen ausgedrückt. Für die bosonischen Operatoren gilt  $[a, a^+]_- = 1$ , während die Vertauschungsrelationen der Spinoperatoren durch

$$[s^+, s^-]_- = 2s^z, \quad [s^z, s^+]_- = s^+, \quad [s^z, s^-]_- = -s^- \quad (4.1)$$

gegeben sind, außerdem gilt  $(s^+)^+ = s^-$ . Für die Eigenfunktion  $|\psi_{sm}\rangle$  eines Spins vom Betrag  $s$  gilt  $s^2|\psi_{sm}\rangle = s(s+1)|\psi_{sm}\rangle$  und  $s^z|\psi_{sm}\rangle = m|\psi_{sm}\rangle$  mit  $m = -s, -s+1, \dots, s$ . Wird  $|n\rangle \equiv |\psi_{s, s-n}\rangle$  definiert ( $n$  beschreibt also die Abweichung des Eigenwertes von  $s^z$  von seinem Maximalwert  $m = s$ ), so folgt

$$s^+|n\rangle = \sqrt{2s+1-n}\sqrt{n}|n-1\rangle, \quad s^-|n\rangle = \sqrt{2s-n}\sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad s^z|n\rangle = (s-n)|n\rangle.$$

Wird nun  $|n\rangle$  als bosonischer  $n$ -Teilchen-Zustand betrachtet, so erhält man durch Vergleich mit  $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  und  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  (für den Teilchenzahloperator

$\hat{n} = a^+a$  gilt  $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ ) für die Spinoperatoren

$$s^z = s - \hat{n}, \quad s^+ = \sqrt{2s}f(s)a, \quad s^- = \sqrt{2s}a^+f(s) \quad \text{mit } f(s) \equiv \sqrt{1 - \hat{n}/(2s)}. \quad (4.2)$$

Diese sogenannte Holstein-Primakoff-Transformation [72] ist eine Darstellung der Spinoperatoren durch Boseoperatoren, welche die Vertauschungsrelationen (4.1) der Spinoperatoren erfüllt.

Es ist jedoch zu beachten, daß der Raum der Eigenfunktionen für einen Spin vom Betrage  $s$   $(2s+1)$ -dimensional ist, während der Raum der Eigenfunktionen von  $\hat{n}$  unendlich-dimensional ist. Entsprechend kann es keine eins-zu-eins Korrespondenz zwischen dem Hilbertraum für Spins auf dem bosonischen Hilbertraum geben. Es gibt also einen *physikalischen* Unterraum mit Besetzungszahlen  $0 \leq n \leq 2s$  und einen *unphysikalischen* Unterraum mit  $n > 2s$  (der z.B. unphysikalischen Eigenwerten  $m < -s$  für  $s^z$  entspricht). Beide Unterräume sind gegenüber den Operatoren (4.2) invariant, da  $s^-|n=2s\rangle = 0$  gilt, ein Hamiltonoperator mit diesen Operatoren würde also physikalische und unphysikalische Zustände nicht verbinden [10]. Praktisch muß jedoch  $f(s)$  immer in einer Potenzreihe (nach Potenzen von  $1/s$ )

$$f(s) = 1 - \frac{\hat{n}}{4s} - \frac{\hat{n}^2}{32s^2} - \dots \quad (4.3)$$

entwickelt werden, die bei einer bestimmten Ordnung abgebrochen wird. In diesem Fall gilt  $s^-|n=2s\rangle = 0$  nicht mehr, und physikalische und unphysikalische Zustände werden verbunden [10]. Dennoch kann eine solche Näherung zu guten Ergebnissen führen, nämlich genau dann, wenn der Erwartungswert von  $\hat{n}$  klein gegenüber  $2s$  ist, d.h. bei

$$\langle \hat{n} \rangle \ll 2s, \quad (4.4)$$

da in diesem Fall die unphysikalischen Zustände keine große Rolle spielen.<sup>1</sup>

Die Entwicklung für  $f(s)$  führt vermutlich nur zu einer asymptotischen Reihe [74], d.h. ihre Konvergenz ist für  $s < \infty$  nicht gesichert. Auch hier ist die Bedingung (4.4) von Bedeutung, sie würde die Konvergenzeigenschaften der Reihe verbessern.

Mit der Bedingung (4.4) kann man auch verstehen, warum die SWT auch für den extremen Fall  $s = 1/2$ , der in dieser Arbeit von Interesse ist, gute Ergebnisse liefern kann. So gilt für das quadratische Gitter in diesem Fall  $\langle \hat{n} \rangle = 0.197$  [10], was ziemlich klein gegenüber  $2s = 1$  ist.

Die Bedingung (4.4) bedeutet aber auch, daß (wegen  $\langle s^z \rangle = s - \langle \hat{n} \rangle$ ) die SWT nur für Systeme mit langreichweitiger Ordnung, bei der die Quantenfluktuationen nur eine geringe Abweichung gegenüber dem klassischen Grundzustand bewirken, gute Ergebnisse liefern kann [10].

Eine andere Darstellung der Spinoperatoren durch Boseoperatoren, welche die Vertauschungsrelationen (4.1) erfüllt, ist die Dyson-Maleev-Transformation [75]

---

<sup>1</sup>In [84] werden die Gewichte der unphysikalischen Zustände im SWT-Grundzustand des  $J_1$ - $J_2$ -Modells mit Spin  $1/2$  untersucht. Dort wird gezeigt, daß die unphysikalischen Zustände eine größere Bedeutung haben wenn die Untergitter-Magnetisierung  $m$  kleiner wird. Aber auch wenn diese Null ist (im Bereich um  $J_2/J_1 = 0.5$ ) haben die unphysikalischen Zustände nur ein Gewicht von rund 20%.

(s. auch Gl. (4.20) weiter unten). Hier wird die Verwendung eines Wurzelausdruckes wie in (4.2) vermieden, die Operatoren  $s^+$  und  $s^-$  sind jedoch nicht zueinander adjungiert, und die Transformation führt somit (im Gegensatz zur Holstein-Primakoff-Transformation) zu einem nichthermiteschen Hamiltonoperator. In der Praxis ist der Dyson-Maleev-Formalismus leichter anwendbar und führt zu einem Hamiltonoperator mit einer einfacheren Form. Dyson konnte für die Transformation (im Falle eines Ferromagneten) zeigen [75], daß die unphysikalischen Zustände ( $n > 2s$ ) für sehr kleine Temperaturen (deutlich kleiner als die Curie-Temperatur des Ferromagneten) kaum noch eine Rolle spielen.

Die SWT führt zu einem Modell wechselwirkender Bosonen, welches teilweise leichter näherungsweise untersucht werden kann als der ursprüngliche Hamiltonoperator mit Spinoperatoren. Die wechselwirkenden Terme (Produkte mit mehr als zwei Boseoperatoren) werden i.allg. mittels Störungsrechnung behandelt. Der kleine Parameter dieser Störungsrechnung ist proportional zu  $1/s$ , d.h. die SWT ist eine Reihenentwicklung nach Potenzen von  $1/s$  [80].<sup>2</sup> Das gilt sowohl für die Holstein-Primakoff-Transformation (wo auch  $f(s)$  nach  $1/s$  entwickelt wird, s. (4.3)) als auch für die Dyson-Maleev-Transformation. Wenn man die Rechnungen konsistent bis zu einer bestimmten Ordnung in  $1/s$  ausführt, zeigt sich [80], daß beide Transformationen (zumindest bis einschließlich der bis jetzt durchgeführten SWT in 2. Ordnung<sup>3</sup>, in der die Magnetisierung bis  $O(1/s^2)$  entwickelt wird) letztendlich zum gleichen Ergebnis führen.

Die Berechnungen bis zur 2. Ordnung für das anisotrope  $XXZ$ -Modell auf dem quadratischen Gitter [80] zeigen auch für den Fall  $s = 1/2$  eine gute Konvergenz der Entwicklung. Allerdings ist es natürlich unmöglich zu sagen, ob sich dieser Trend auch für höhere Ordnungen fortsetzt, oder ob die Spinwellenentwicklung letztendlich doch divergiert, wie man es für eine asymptotische Entwicklung (bei  $s < \infty$ ) erwarten kann. Zu bemerken ist weiter, daß sich bei diesen Berechnungen auch keine Probleme mit der Nichthermitizität des Dyson-Maleev-Hamiltonoperators ergaben.

Die Spinwellentheorie wird seit vielen Jahren auf verschiedene Modelle in den verschiedenen Ordnungen angewendet und stellt eine etablierte Methode für Spinsysteme dar (s. z.B. Ref. [76] bis [85]).

### Transformation in der lineare Spinwellentheorie

In der linearen Spinwellentheorie (LSWT) auch SWT 0. Ordnung genannt, ver-

---

<sup>2</sup>Tatsächlich erfolgt die Entwicklung nach Potenzen von  $x/(zs)$ , wobei  $z$  die Koordinationszahl (Zahl der nächsten Nachbarn) des Gitters ist [10].  $x$  ist dabei vermutlich nicht einfach gleich eins (wie häufig angenommen wird), sondern ein komplizierterer Ausdruck der (s. auch die Entwicklung für  $f(s)$  in Gl. (4.3)) möglicherweise proportional zur mittleren Besetzungszahl der Bosonen ist [79]. Da diese Besetzungszahl vom konkreten Modell abhängt, ist es verständlich, daß auch der Fall  $s = 1/2$  zu vernünftigen Ergebnissen führen kann.

<sup>3</sup>Bemerkung zur Notation: In dieser Arbeit bezeichnet die Ordnung der SWT die Ordnung in der Störungsrechnung, mit der die bosonischen Wechselwirkungsterme berücksichtigt werden. 0. Ordnung bedeutet dann, daß diese Terme nicht berücksichtigt werden, also die lineare SWT (LSWT). In der Literatur wird jedoch teilweise bereits die LSWT als SWT 1. Ordnung bezeichnet, da die LSWT sozusagen schon die erste Korrektur zum klassischen Zustand darstellt. Das muß beim Vergleich beachtet werden.

nachlässigt man die Wechselwirkungen zwischen den Bosonen. Dadurch kann der bosonische Hamiltonoperator zwar exakt gelöst werden, stellt aber nur eine starke Näherung des ursprünglichen Spinmodells dar.

In der LSWT wird folgende Transformation für die Spinoperatoren durchgeführt (die Dyson-Maleev-Transformation [75] und die Holstein-Primakoff-Transformation [72] sind für diesen Fall identisch):

$$s^+ = \sqrt{2sa}, \quad s^- = \sqrt{2sa^+}, \quad s^z = s - a^+a. \quad (4.5)$$

Mit dieser Transformation wird eine der drei Vertauschungsrelationen (4.1) der Spinoperatoren nicht erfüllt, es ist nämlich

$$[s^+, s^-]_- = 2s[a, a^+]_- = 2s \neq 2s^z.$$

### Aufstellen des bosonischen Hamiltonoperators

In der Transformation (4.5) stellen die Bosonen als Magnonen (elementare Anregungen des Spinsystems – „Spinwellen“) die Abweichungen vom klassischen Spinzustand (mit Spins in  $z$ -Richtung) dar. Man muß also (ähnlich wie in der CCM) von einem bestimmten klassischen Spinzustand ausgehen, der nach Möglichkeit bereits eine gewisse Näherung des Grundzustandes des zu untersuchenden Modells darstellen sollte. Deshalb wird hier vom *klassischen Grundzustand* des  $J$ - $J'$  Modells ausgegangen, also von dem helixartigen Zustand, der in Abb. 2.2 dargestellt ist (zur SWT für einen helixartigen Zustand s. beispielsweise [77]).

Nun gilt aber Gl. (4.5) nur für einen ferromagnetischen Zustand, bei dem alle Spins in  $z$ -Richtung zeigen, d.h. nur in einem solchen Fall würden alle Spins mittels (4.5) transformiert werden. Im helixartigen Zustand, der hier verwendet werden soll, stehen die Spins aber in bestimmten verschiedenen Winkeln zueinander. Die Situation ist analog zu den Betrachtungen zum CCM-Modellzustand (Abschnitt 3.2.1), und wie dort, so müssen auch hier lokale Koordinatentransformationen angewendet werden, damit alle Spins in eine Richtung ( $z$ -Richtung) zeigen und (4.5) benutzt werden kann. Mit (3.14) erhält man somit unter Verwendung von (4.5) für das Produkt zweier Spins welche im Winkel  $\varphi$  zueinander stehen

$$\begin{aligned} (\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j)_\varphi = & s^2 \cos \varphi + \sqrt{\frac{s^3}{2}} \sin \varphi (a_i - a_j + a_i^+ - a_j^+) - \frac{1}{2}s \{ 2 \cos \varphi (a_i^+ a_i + a_j^+ a_j) \\ & - (\cos \varphi + 1)(a_i^+ a_j + a_i a_j^+) - (\cos \varphi - 1)(a_i a_j + a_i^+ a_j^+) \} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Dabei wurden Terme mit Produkten von mehr als zwei Boseoperatoren vernachlässigt, da sie nicht zur LSWT gehören.

Da die Elementarzelle des Gitters zwei Spins enthält (s. auch Abb. 2.1), ist es auch zweckmäßig, zwei verschiedene Arten von Bosonen einzuführen<sup>4</sup>. Jedem der beiden Untergitter  $A$  und  $B$  wird eine Art von Bosonen zugeordnet. Für das Untergitter  $B$

---

<sup>4</sup>Das ist deshalb sinnvoll, weil der bosonische Hamiltonoperator nur eine Näherung darstellt, bzw. nicht exakt gelöst werden kann. Durch die Verwendung zweier Bosonen wird zusätzliche Information über das Modell in die Näherung eingebracht. Dadurch kann die Näherung verbessert werden.

werden die Boseoperatoren  $b$  mittels  $a_j = -b_j$  und  $a_j^+ = -b_j^+$  eingeführt<sup>5</sup>, mit (4.6) entsteht dann für zwei Spins verschiedener Untergitter, die im Winkel  $\varphi$  zueinander stehen

$$(\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j)_\varphi |_{i \in A, j \in B} = s^2 \cos \varphi + \sqrt{\frac{s^3}{2}} \sin \varphi (a_i + b_j + a_i^+ + b_j^+) - \frac{1}{2} s \{ 2 \cos \varphi (a_i^+ a_i + b_j^+ b_j) + (\cos \varphi + 1)(a_i^+ b_j + a_i b_j^+) + (\cos \varphi - 1)(a_i b_j + a_i^+ b_j^+) \} \quad (4.7)$$

Mittels einer Fourier-Transformation

$$a_i = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}, \quad b_j = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}} \quad (4.8)$$

(die Summation über  $\mathbf{k}$  erfolgt über die  $N/2$  Plätze der 1. Brillion-Zone des Modells) erhält man für den Hamiltonoperator des  $J$ - $J'$ -Modells (in transformierter Form nach Gl. (3.16)) mit (4.7) unter Verwendung des helixartigen Grundzustandes (s. Gl. (2.8)) und Abb. 2.2, mit dem charakteristischen Winkel  $\Phi = \Phi_{kl}$  nach Gl. (2.7))

$$H = -\frac{N}{2} s^2 C + sC \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}^+ + B_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^+ + B_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}], \quad (4.9)$$

wobei

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &\equiv \frac{1}{2C} [3(\cos(\Phi) + 1)\gamma_{1\mathbf{k}} + J'(\cos(3\Phi) + 1)\gamma_{2\mathbf{k}}], \\ B_{\mathbf{k}} &\equiv \frac{1}{2C} [3(\cos(\Phi) - 1)\gamma_{1\mathbf{k}} + J'(\cos(3\Phi) - 1)\gamma_{2\mathbf{k}}], \\ C &\equiv 3 \cos(\Phi) + J' \cos(3\Phi), \\ \gamma_{1\mathbf{k}} &= \frac{1}{3} \sum_{p \neq p'} e^{-i\mathbf{k}p} = \frac{1}{3} [\cos k_x + 2 \cos k_y + i \sin k_x], \\ \gamma_{2\mathbf{k}} &= e^{-i\mathbf{k}p'} = \cos k_x - i \sin k_x \end{aligned} \quad (4.10)$$

(für den Zusammenhang zwischen dem Winkel  $\varphi$  benachbarter Spins und  $\Phi$  s. auch Gl. (3.17)). Die Gl. (4.9) ist nur im *thermodynamischen Limes* ( $N \rightarrow \infty$ ) korrekt, da nur dort die Terme mit nur einem Boseoperator verschwinden. Diese Terme sind wegen

$$\begin{aligned} \sum_{i \in A} \sum_p a_i &= \sum_{i \in A} \sum_p \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2}{N}} \frac{N}{2} \sum_p \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k},0} a_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{N}{2}} \sum_p a_0, \\ &\Rightarrow \sum_{i \in A} \sum_p (a_i + b_j + a_i^+ + b_j^+) = \sqrt{\frac{N}{2}} \sum_p (a_0 + b_0 + a_0^+ + b_0^+), \end{aligned}$$

nur proportional zu  $\sqrt{N}$ , im Gegensatz zu den anderen Termen in (4.9), welche proportional zu  $N$  sind. Es ist zu beachten, daß die Terme mit nur einem Boseoperator

---

<sup>5</sup>Das negative Vorzeichen wird verwendet, damit (wenn in (4.7) der Winkel  $\varphi = \pi$  gesetzt wird) das Ergebnis für den Néelzustand in der üblichen Notation entsteht, d.h.

$$\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j |_{i \in A, j \in B}^{\text{Néel}} = -s^2 + s(a_i^+ a_i + b_j^+ b_j + a_i b_j + a_i^+ b_j^+).$$

in der Ein-Bosonen-Schreibweise (wegen  $b_0 = -a_0$ ) für jedes  $N$  verschwinden. Für den *Néelzustand* ( $\Phi = 0$ ) ergibt sich

$$C = 3 + J', \quad A_{\mathbf{k}} = \frac{3\gamma_{1\mathbf{k}} + J'\gamma_{2\mathbf{k}}}{3 + J'}, \quad B_{\mathbf{k}} = 0. \quad (4.11)$$

### Diagonalisieren des bosonischen Hamiltonoperators

Die Diagonalisierung quadratischer bosonischer Operatoren wie in Gl. (4.9) ist immer mittels einer Bogoljubow-Transformation [69] durchführbar. Die Rechnung wird aber bei einer größeren Anzahl von Bosonen sehr aufwendig. Obwohl hier ursprünglich nur zwei verschiedene Bosonen (entsprechend den beiden Untergittern) eingeführt wurden, zeigt eine nähere Analyse (s. die folgende Betrachtung), daß praktisch vier verschiedene Operatoren vorkommen, was eine Bogoljubow-Transformation recht kompliziert machen würde. Deshalb soll hier die Coupled-Cluster-Methode (CCM) zur (numerisch) exakten Diagonalisierung von (4.9) verwendet werden.

Für (4.9) kann man

$$H = -\frac{N}{2}s^2C + sC \sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} \quad (4.12)$$

schreiben, und die einzelnen Summanden  $H_{\mathbf{k}}$  separat diagonalisieren, sofern sie für verschieden  $\mathbf{k}$ -Werte miteinander vertauschen. Es läßt sich aber leicht zeigen, daß

$$[H_{\mathbf{k}}, H_{\mathbf{k}'}]_- = 0 \quad \text{für } \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'; \quad \text{aber: } [H_{\mathbf{k}}, H_{-\mathbf{k}}]_- \neq 0 \quad \text{für } B_{\mathbf{k}} \neq 0.$$

Da die Summation über  $\mathbf{k}$  symmetrisch um den Punkt  $\mathbf{k} = (0, 0)$  erfolgt, gibt es in der Summe immer Paare von  $H_{\mathbf{k}}$  und  $H_{-\mathbf{k}}$ , die nicht miteinander vertauschen. Es gilt aber folgende Identität

$$\sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} (H_{\mathbf{k}} + H_{-\mathbf{k}})/2 \equiv \sum_{\mathbf{k}} H'_{\mathbf{k}}; \quad \Rightarrow [H'_{\mathbf{k}}, H'_{\mathbf{k}'}]_- = 0 \quad \forall \mathbf{k}, \mathbf{k}'.$$

Die einzelnen symmetrisierten Summanden  $H'_{\mathbf{k}}$  vertauschen also immer, und lassen sich folglich (z.B. mit der CCM) getrennt diagonalisieren.

Es bleibt also das Problem die quadratische Form

$$\begin{aligned} 2H'_{\mathbf{k}} = & A_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+b_{-\mathbf{k}}^+) + A_{\mathbf{k}}^*(a_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}}^+ + a_{-\mathbf{k}}b_{-\mathbf{k}}) \\ & + B_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}}b_{-\mathbf{k}}^+ + a_{-\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}}) + B_{\mathbf{k}}^*(a_{\mathbf{k}}^+b_{-\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}}^+) \\ & + a_{\mathbf{k}}^+a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+a_{-\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^+b_{-\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit den vier verschiedenen Boseoperatoren  $a_{\mathbf{k}}$ ,  $a_{-\mathbf{k}}$ ,  $b_{\mathbf{k}}$  und  $b_{-\mathbf{k}}$  zu diagonalisieren. Das wurde hier für den *Grundzustand* mittels der CCM durchgeführt. Der Anhang B beschreibt eine computeralgebraische Implementierung der CCM, die es erlaubt, beliebig komplizierte quadratische bosonische Systeme exakt zu behandeln. Wie dort dargelegt wird, führt das für den Hamiltonoperator (4.13), welcher vier verschiedene Boseoperatoren enthält, zu zehn nichtlinearen gekoppelten Ket-Zustandsgleichungen. Das Gleichungssystem wird numerisch gelöst, und es zeigt sich, daß lediglich vier der zehn Korrelationskoeffizienten ungleich Null sind. Die numerische Analyse ergab

konkret, daß  $e^S|0\rangle$  mit dem bosonischen Vakuumzustand  $|0\rangle$  und mit dem Korrelationsoperator des Ket-Zustandes

$$S = f_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ + b_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+) + g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}^+ + h_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+$$

der *exakte* Grundzustand von  $H'_{\mathbf{k}}$  ist, wobei die drei Korrelationskoeffizienten  $f_{\mathbf{k}}, g_{\mathbf{k}}, h_{\mathbf{k}}$  durch das nichtlineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* f_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^* h_{\mathbf{k}} + 4f_{\mathbf{k}} &= 0 \\ A_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}^2 + 2g_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^*(1 + f_{\mathbf{k}}^2) + 2B_{\mathbf{k}}^* f_{\mathbf{k}} &= 0 \\ A_{\mathbf{k}}^* h_{\mathbf{k}}^2 + 2h_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}(1 + f_{\mathbf{k}}^2) + 2B_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} &= 0 \end{aligned}$$

bestimmt werden. Die weitere numerische Analyse<sup>6</sup> ergab, daß  $f_{\mathbf{k}}$  reell und  $h_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}}^*$  ist. Für die Grundzustandsenergie von  $H'_{\mathbf{k}}$  folgt dann  $(A_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*)/2$ , somit ist die Grundzustandsenergie von (4.9) durch

$$E = -\frac{N}{2} s^2 C + sC \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} [A_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* g_{\mathbf{k}}^*] \quad (4.14)$$

gegeben. Der magnetische Ordnungsparameter ist

$$m = \langle s^z \rangle = s - (2/N) \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = s - (2/N) \sum_{\mathbf{k}} (\tilde{f}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} + \tilde{g}_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}), \quad (4.15)$$

wobei die Korrelationskoeffizienten mit Tilde zum Bra-Zustand gehören.

### Ein-Bosonen-Darstellung

Der bisher untersuchte bosonische Hamiltonoperator (4.9) stellt eine Zwei-Bosonen-Darstellung innerhalb der LSWT für das  $J$ - $J'$ -Modell dar, d.h. für die beiden Untergitter des Modells wurden verschiedene Bosonen eingeführt.

In der hier kurz angegebenen Ein-Bosonen-Darstellung wird diese Unterscheidung nicht gemacht, d.h. alle Spins des Modells werden (nach den lokalen Koordinatentransformationen) auf dieselbe Art (d.h. nach Gl. (4.5)) in bosonische Operatoren transformiert und man erhält (4.6). Ausgehend von diesem Ausdruck und unter Verwendung der Fourier-Transformation<sup>7</sup>

$$a_i = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}}$$

bekommt man für den Hamiltonoperator (3.16) des Modells (wie bereits erwähnt, treten Terme mit nur einem Boseoperator in der Ein-Bosonen-Darstellung nicht auf)

$$\begin{aligned} H &= -\frac{N}{2} s^2 C - \frac{1}{2} sC \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ + B_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ + B_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} - 2a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}] \\ &= -\frac{N}{2} s^2 C - \frac{1}{2} sC \sum_{\mathbf{k}} [\Re(A_{\mathbf{k}})(a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+) + 2(\Re(B_{\mathbf{k}}) - 1)a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}] \end{aligned}$$

<sup>6</sup>Das GLS führt auf eine Gleichung 4. Grades für  $f_{\mathbf{k}}$ , dessen analytische Lösung sehr kompliziert und physikalisch wenig aussagekräftig ist; das numerische Lösen des GLS ist einfacher.

<sup>7</sup>Die Summation erfolgt jetzt über  $N$  Plätze im  $\mathbf{k}$ -Raum, d.h. über die doppelte 1. Brillion-Zone des Modells; die 1. Brillion-Zone allein kann nicht verwendet werden, da eine Unterscheidung der beiden Spins in der Elementarzelle des Modells in der Ein-Bosonen-Darstellung nicht erfolgt.

Dabei wurde z.B.

$$\sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + A_{-\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}) / 2 = \sum_{\mathbf{k}} \Re(A_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}$$

mit  $A_{-\mathbf{k}} = A_{\mathbf{k}}^*$  verwendet. Es folgt weiter

$$H = -\frac{N}{2} s^2 C + \frac{1}{2} s C \sum_{\mathbf{k}} (1 - \Re(B_{\mathbf{k}})) \left[ -D_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+) + 2a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \right], \quad (4.16)$$

$$\text{mit } D_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\Re(A_{\mathbf{k}})}{1 - \Re(B_{\mathbf{k}})}.$$

Der Ausdruck in der eckigen Klammer kann dann leicht mit einer Bogoljubow-Transformation [69]

$$a_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^+, \quad a_{-\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \quad (4.17)$$

mit

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - D_{\mathbf{k}}^2}} + \frac{1}{2}, \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - D_{\mathbf{k}}^2}} - \frac{1}{2}$$

diagonalisiert werden,

$$\Rightarrow H = -\frac{N}{2} s^2 C + \frac{1}{2} s C \sum_{\mathbf{k}} (1 - \Re(B_{\mathbf{k}})) \left[ \sqrt{1 - D_{\mathbf{k}}^2} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}} + 1) - 1 \right]. \quad (4.18)$$

Bei  $J' \geq -1/3$  gibt es zwei Nullmoden im Spektrum, wohingegen es bei  $J' < -1/3$  nur eine Nullmode (bei  $\mathbf{k} = (0, 0)$ ) gibt. Grundsätzlich sollte es in der helixartigen Phase (bei  $J' < -1/3$ ) drei Nullmoden (Goldstone-Moden) geben, da hier alle drei Rotationssymmetrien des Hamiltonoperators<sup>8</sup> im Grundzustand gebrochen sind. Der Grund für die Diskrepanz dürfte in der verwendeten Näherung liegen, und sollte bei Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Magnonen verschwinden.

Für den magnetischen Ordnungsparameter ergibt sich

$$m = \langle s^z \rangle = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 = s - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - D_{\mathbf{k}}^2}} - \frac{1}{2} \right]. \quad (4.19)$$

## 4.2 Spinwellentheorie in höheren Ordnungen für die Néelphase

Während im letzten Abschnitt die Wechselwirkung der Bosonen (Magnonen) stets vernachlässigt wurden (Lineare Spinwellentheorie oder SWT 0. Ordnung), werden sie hier näherungsweise berücksichtigt. Das erfolgt mittels Störungsrechnung und durch

---

<sup>8</sup>Hier sind nicht die Punktsymmetrien des Gitters gemeint, sondern die Tatsache, daß das Heisenberg-Modell rotationsinvariant ist.

Umordnen der Wechselwirkungsterme in eine normalgeordnete Form (renormierte Spinwellentheorie). Im Gegensatz zur quadratischen Form der LSWT kann man den allgemeinen bosonischen Hamiltonoperator mit Wechselwirkung nicht exakt behandeln.

Allen Betrachtungen in diesem Abschnitt wurde der Néelzustand ( $\Phi = 0$ ) als Ausgangspunkt für die Spinwellenrechnung zugrunde gelegt. Den beiden Untergittern des  $J$ - $J'$ -Modells werden dabei verschiedenen Bosonen zugeordnet (Zwei-Bosonen-Darstellung).

### 4.2.1 Spinwellentheorie 1.Ordnung

Hier werden innerhalb der normale SWT die Wechselwirkungsterme in 1. Ordnung (d.h. die Entwicklung wird für die Magnetisierung bis  $O(1/s)$  betrachtet) mittels Störungsrechnung behandelt.<sup>9</sup> Die Bosonisierung des Spinhamiltonoperators erfolgt unter Verwendung der übliche Dyson-Maleev-Transformation [75],

$$\begin{aligned} \text{Untergitter } A: \quad s^+ &= \sqrt{2s} \left(1 - \frac{a^+ a}{2s}\right) a, & s^- &= \sqrt{2s} a^+, & s^z &= s - a^+ a \\ \text{Untergitter } B: \quad s^+ &= \sqrt{2s} b^+ \left(1 - \frac{b^+ b}{2s}\right), & s^- &= \sqrt{2s} b, & s^z &= b^+ b - s \end{aligned} \quad (4.20)$$

für die Spins der beiden Untergitter. Die Dyson-Maleev-Transformation bewirkt, daß die Vertauschungsrelationen (4.1) der Spinoperatoren erhalten bleiben. Allerdings wird die Relation  $(s^+)^+ = s^-$  durch die Transformation nicht erfüllt. Das führt letztlich dazu, daß der Wechselwirkungsterm  $V_{\text{DM}}$  des bosonischen Hamiltonoperators, und speziell sein normalgeordneter Teil  $V_{\text{DM}}^{(4)}$  (s. unten und Anhang C) nicht hermitisch sind.

Im Néelzustand sind die Spins aus dem Untergitter  $B$  um den Winkel  $\pi$  gegenüber denen aus  $A$  gedreht. Das ist in der entsprechenden Transformation für das Untergitter  $B$  in Gl. (4.20) bereits berücksichtigt. Die Spinoperatoren selber dürfen hier also *nicht* auch noch rotationstransformiert werden.

Mit  $\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j = s_i^z s_j^z + (1/2)(s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+)$  und Gl. (4.20) folgt somit für das Produkt zweier Spins verschiedener Untergitter

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \Big|_{i \in A, j \in B}^{\text{Néel}} &= -s^2 + s(a_i^+ a_i + b_j^+ b_j + a_i b_j + a_i^+ b_j^+) \\ &\quad - a_i^+ a_i b_j^+ b_j - \frac{1}{2} a_i^+ a_i a_i b_j - \frac{1}{2} a_i^+ b_j^+ b_j^+ b_j \end{aligned} \quad (4.21)$$

Abgesehen von den drei Wechselwirkungstermen ist das identisch mit (4.7) bei  $\varphi = \pi$ . Genau wie für die LSWT wird nun wieder eine Fourier-Transformation nach Gl. (4.8) durchgeführt. Für den Hamiltonoperator des  $J$ - $J'$ -Modells nach Gl. (2.1) folgt dann

$$\begin{aligned} H &= E_0 + H_0 + V_{\text{DM}}, \quad \text{mit} \\ E_0 &= -\frac{N}{2} s^2 (3 + J') = -2N s^2 (1 - \kappa_0), \quad \text{mit } \kappa_0 \equiv (1 - J')/4 \\ H_0 &= s(3 + J') \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}^+], \end{aligned} \quad (4.22)$$

---

<sup>9</sup>Die Störungsrechnung 1. Ordnung für das einfache quadratische Gitter ( $J' = 1$ ) wurde erstmalig von Oguchi [76] behandelt, in [80] wird auch noch die 2. Ordnung für dieses System durchgeführt.

$$V_{\text{DM}} = -\frac{2}{N}(3+J') \sum_{1-4} \Delta(1+2-3-4) [A_{1-4}^* a_3^+ a_2 b_1^+ b_4 + \frac{1}{2} A_4 a_3^+ a_2 a_1 b_4 + \frac{1}{2} A_{2+1-4}^* a_3^+ b_2^+ b_1^+ b_4] \quad (4.23)$$

Der Ausdruck  $E_0 + H_0$  entspricht der LSWT und ist damit identisch zu (4.9) bei Verwendung des Néelzustandes ( $\Phi = 0$ , also mit Gl. (4.11)). Für  $A_{\mathbf{k}}$  nach (4.11) läßt sich auch

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3+J'} [4\mu_{\mathbf{k}} - (1-J')e^{-ik_x}], \quad \mu_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y) \quad (4.24)$$

schreiben, wobei  $\mu_{\mathbf{k}}$  der Strukturfaktor des einfachen quadratischen Gitters ist, dieser ist bei  $J' = 1$  also identisch zu  $A_{\mathbf{k}}$ . Die bosonische Dyson-Maleev-Wechselwirkung wird durch  $V_{\text{DM}}$  in Gl. (4.23) beschrieben. Dabei wurde zur Vereinfachung anstelle der verschiedenen  $\mathbf{k}$ -Vektoren  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  usw. nur die Zahlen 1, 2 usw. geschrieben. Die Summation erfolgt in (4.23) über alle vier  $\mathbf{k}$ -Vektoren ( $\mathbf{k}_1$  bis  $\mathbf{k}_4$ ),  $\Delta(\mathbf{k})$  ist die Kronecker-Funktion.

Nun wird  $H$  (aus Gl. (4.22)) einer Bogoljubow-Transformation [69]

$$a_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}^+, \quad b_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^+, \quad |u_{\mathbf{k}}^2| - |v_{\mathbf{k}}^2| = 1 \quad (4.25)$$

mit den (im allgemeinen) komplexen Koeffizienten  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  unterzogen. Durch die Forderung, daß  $H_0$  diagonal wird, also durch

$$2u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}^*u_{\mathbf{k}}^{*2} + A_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 \stackrel{!}{=} 0, \quad (4.26)$$

$$\Rightarrow u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1-|A_{\mathbf{k}}|^2}}} = \sqrt{\frac{1-\kappa_0 + \varepsilon_{s\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{s\mathbf{k}}}}, \quad (4.27)$$

$$x_{\mathbf{k}} \equiv -\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{A_{\mathbf{k}}^*}{1 + \sqrt{1-|A_{\mathbf{k}}|^2}} = \frac{\mu_{\mathbf{k}} - \kappa_0 e^{ik_x}}{1 - \kappa_0 + \varepsilon_{s\mathbf{k}}}, \quad (4.28)$$

folgt

$$H_0 = 4s \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{s\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} + 1) - \frac{N}{2} (3+J')s \quad (4.29)$$

mit  $\varepsilon_{s\mathbf{k}} = \sqrt{(1-\mu_{\mathbf{k}}^2) - 2\kappa_0(1-\mu_{\mathbf{k}} \cos k_x)} = (1-\kappa_0) \sqrt{1-|A_{\mathbf{k}}|^2}$ .

Es ist zu beachten, daß die Lösung für  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  nur bis auf einen irrelevanten Phasenfaktor bestimmbar ist, der so gewählt wurde, daß  $u_{\mathbf{k}}$  reell ist. Es ist hier aber nicht möglich, diesen Phasenfaktor so zu wählen, daß beide Bogoljubow-Koeffizienten reell sind. Das liegt an der fehlenden Inversionssymmetrie des Modells bei  $J' \neq 1$ . Mit diesen Ergebnissen erhält man für die Grundzustandsenergie und die Magnetisierung in der SWT 0. Ordnung (also ohne Berücksichtigung von  $V_{\text{DM}}$ )

$$E = -2s(s+1)(1-\kappa_0)N + 4s \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{s\mathbf{k}}, \quad m = s + \frac{1}{2} - \frac{1-\kappa_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{s\mathbf{k}}}. \quad (4.30)$$

Da die bisherigen Betrachtungen der LSWT entsprechen, sind diese Ergebnisse selbstverständlich identisch zu denen (in Zwei-Bosonen-Darstellung) aus dem vorherigen Abschnitt 4.1.

Das Anregungsspektrum  $\varepsilon_{s\mathbf{k}}$  ist zweifach entartet, und somit für die beiden Bosonensorten  $\alpha_{\mathbf{k}}$  und  $\beta_{\mathbf{k}}$  gleich.

### Störungstheorie 1. Ordnung

Mit der Grundzustandsenergie in 0. Ordnung ( $E$ ) läßt sich nun für (4.22)

$$H = E + H_0^{(2)} + V_{\text{DM}}, \quad \text{mit } H_0^{(2)} = 4s \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{s\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \quad (4.31)$$

schreiben, wobei  $H_0 = H_0^{(0)} + H_0^{(2)}$  (Trennung in Terme mit Null und mit zwei normalgeordneten<sup>10</sup> Boseoperatoren) und  $E = E_0 + H_0^{(0)}$  gilt (s. Gl. (4.22),  $E_0$  ist die klassische Grundzustandsenergie).

Nachdem  $H_0^{(2)}$  in diagonalisierter Form vorliegt, kann nun der Einfluß des bosonischen Wechselwirkungsterms  $V_{\text{DM}}$  mit der *stationären Störungsrechnung* behandelt werden, um näherungsweise den Grundzustand von  $H_0^{(2)} + V_{\text{DM}}$  zu bestimmen.

Seien die  $|n\rangle$  die Eigenfunktionen von  $H_0^{(2)}$ , d.h. (mit  $l, m = 0, 1, \dots$ )

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \alpha_{\mathbf{k}_1}^+ \cdots \alpha_{\mathbf{k}_l}^+ \beta_{\mathbf{k}_1}^+ \cdots \beta_{\mathbf{k}_m}^+ |0\rangle, \\ H_0^{(2)} |n\rangle &= 4s(\varepsilon_{s\mathbf{k}_1} + \cdots + \varepsilon_{s\mathbf{k}_l} + \varepsilon_{s\mathbf{k}_1} + \cdots + \varepsilon_{s\mathbf{k}_m}) |n\rangle \equiv \mathcal{E}_n |n\rangle, \end{aligned}$$

wobei  $|0\rangle$  (entspricht  $l, m = 0$ ) der bosonische Vakuumzustand und der Grundzustand von  $H_0^{(2)}$  mit dem Eigenwert  $\mathcal{E}_0 = 0$  ist.

Die 1. Korrektur zur *Grundzustandsenergie* ist  $\langle 0 | V_{\text{DM}} | 0 \rangle$ . Wenn  $V_{\text{DM}}$  normalgeordnet ist (s. Anhang C), können nur die Terme ohne Boseoperatoren (mit  $V_{\text{DM}}^{(0)}$  bezeichnet) zur Korrektur beitragen, normalgeordnete Terme können ansonsten keinen Beitrag liefern, da die Vernichtungsoperatoren in ihnen rechts von den Erzeugungsoperatoren stehen, und damit immer zuerst auf  $|0\rangle$  angewendet werden. Für die Korrektur ergibt sich also

$$\Delta E^{(1)} = \langle 0 | V_{\text{DM}} | 0 \rangle = \langle 0 | V_{\text{DM}}^{(0)} | 0 \rangle = V_{\text{DM}}^{(0)}. \quad (4.32)$$

Zusammenfassend sind die Beiträge zur Grundzustandsenergie ( $E$ ) der SWT 1. Ordnung also durch

$$\begin{aligned} E_0 &= -2Ns^2(1 - \kappa_0) && \text{klass. Anteil, Gl. (4.22)} \\ H_0^{(0)} &= 4Ns[-\frac{1}{2}(1 - \kappa_0) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{s\mathbf{k}}] = 4Ns(a_2 - \kappa_0 a_1) && \text{nach Gl. (4.29)} \\ V_{\text{DM}}^{(0)} &= 2N(-a_2^2 + \kappa_0 a_1^2) && \text{nach Gl. (C.3)} \end{aligned}$$

gegeben (mit  $a_1$  und  $a_2$  nach (C.2)), damit folgt

$$E = E_0 + H_0^{(0)} + V_{\text{DM}}^{(0)} = -2N(s - a_2)^2 + 2N\kappa_0(s - a_1)^2. \quad (4.33)$$

---

<sup>10</sup>zum Begriff normalgeordnet s. Anhang C

Den Erwartungswert eines beliebigen Operators  $P$  im Grundzustand von  $H_0^{(2)} + V_{\text{DM}}$  kann man nach Ordnungen des Störungsterms  $V_{\text{DM}}$  entwickeln,

$$\langle P \rangle = \langle 0|P|0 \rangle + \Delta P^{(1)} + \dots,$$

wobei für die Terme in 1. Ordnung (die linear in  $V_{\text{DM}}$  sind)

$$\Delta P^{(1)} = \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0|V_{\text{DM}}|n \rangle \langle n|P|0 \rangle}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_n} + \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n|V_{\text{DM}}|0 \rangle \langle 0|P|n \rangle}{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_n} \quad (4.34)$$

gilt. Ersetzt man  $P$  durch den Operator der Untergitter-Magnetisierung,

$$\begin{aligned} m &= \frac{2}{N} \sum_{i \in A} s_i^z = s - \frac{2}{N} \sum_{i \in A} a_i^+ a_i = s - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \\ &= s - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ |u_{\mathbf{k}}|^2 \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + |v_{\mathbf{k}}|^2 \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}^+ + (u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ + \text{h.c.}) \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

so kann die 1. Korrektur zu  $m$  bestimmt werden. Damit  $\langle 0|m|n \rangle \neq 0$  ist (bei  $|n \rangle \neq |0 \rangle$ ), muß  $|n \rangle = \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ |0 \rangle$  gesetzt werden, es folgt  $\mathcal{E}_n = 8s\varepsilon_{s\mathbf{k}}$  und

$$\langle 0|m|n \rangle = -(2/N)u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*, \quad \langle n|m|0 \rangle = -(2/N)u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}.$$

Zu  $\langle 0|V_{\text{DM}}|n \rangle$  mit normalgeordnetem  $V_{\text{DM}}$  kann also nur der Teil (hier mit  $V$  bezeichnet) von  $V_{\text{DM}}^{(2)}$  beitragen, der proportional zu  $\alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+$  bzw. zu  $\alpha_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}}$  ist. Sei

$$V = \sum_{\mathbf{k}'} \left( D_{\mathbf{k}'}^* \alpha_{\mathbf{k}'}^+ \beta_{\mathbf{k}'}^+ + \text{h.c.} \right)$$

so gilt

$$\langle 0|V_{\text{DM}}|n \rangle = \langle 0|V|n \rangle = D_{\mathbf{k}}, \quad \text{und analog } \langle n|V_{\text{DM}}|0 \rangle = D_{\mathbf{k}}^*.$$

Mit (4.34) hat man dann

$$\Delta m^{(1)} = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{D_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + D_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*}{8s\varepsilon_{s\mathbf{k}}},$$

wobei mit (s. Gl. (C.4))

$$D_{\mathbf{k}}^* = -4a_2 \sum_{\mathbf{k}} \left[ 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \mu_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^{*2} + v_{\mathbf{k}}^2) \right] + (1 - J') a_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[ 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + e^{ik_x} u_{\mathbf{k}}^{*2} + e^{-ik_x} v_{\mathbf{k}}^2 \right]$$

schließlich als 1. Korrektur für die Magnetisierung (die proportional zu  $1/s$  ist)

$$\begin{aligned} \Delta m^{(1)} &= \frac{a_0}{s} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\mu_{\mathbf{k}} - \kappa_0 \cos k_x)(\cos k_x - \mu_{\mathbf{k}}) - \kappa_0 \sin^2 k_x}{\varepsilon_{s\mathbf{k}}^3}, \\ \text{mit } a_0 &= -\frac{\kappa_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\kappa_0(1 - \mu_{\mathbf{k}} \cos k_x) + \mu_{\mathbf{k}}(\mu_{\mathbf{k}} - \cos k_x)}{\varepsilon_{s\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (4.36)$$

folgt. Bei  $J' = 1$  ist  $\Delta m^{(1)} = 0$ , was auch sofort daran zu erkennen ist, daß für diesen Fall die eckige Klammer des ersten Anteils von  $D_{\mathbf{k}}^*$  identisch zu Gl. (4.26) ist, und  $D_{\mathbf{k}}^*$  somit verschwinden muß (s. auch [80]).

Die Resultate der Magnetisierung zeigen für die Standard-SWT am klassischen Phasenübergangspunkt  $J'_c = -1/3$  eine Divergenz (besonders deutlich bei der SWT 1. Ordnung, s. Abb. 5.2a weiter unten), welche eine wichtige Motivation für die Durchführung der folgenden renormierten SWT war. Die Divergenz hat ihre Ursache im Auftreten von *soft lines* im Spektrum der niedrigsten Energieanregungen in der Nähe des Übergangspunktes (also bei  $J' \approx -1/3$ ). Wird  $\varepsilon_{s\mathbf{k}}$  (nach Gl. (4.29)) für kleine  $\mathbf{k} \approx (0, 0)$  entwickelt, so erhält man nämlich

$$\varepsilon_{s\mathbf{k}} \approx \sqrt{3/8k_x^2(1/3 + J') + 1/8k_y^2(3 + J')}.$$

Die Divergenz in der Magnetisierung ist bereits in Form einer logarithmischen Divergenz in der LSWT zu erkennen, da bei  $J' \approx -1/3$

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{s\mathbf{k}}} \propto \ln \frac{1}{|J' + 1/3|},$$

und somit (in der LSWT)  $m \propto \ln |J' + 1/3|$  gilt. In der ersten Ordnung wird die Divergenz dann deutlicher.

Das Auftreten von Divergenzen wie hier beim  $J$ - $J'$ -Modell ist durchaus typisch für frustrierte Systeme, so findet man es beispielsweise auch im  $J_1$ - $J_2$ -Modell beim klassischen Phasenübergangspunkt  $J_2 = 1/2J_1$  [82].

## 4.2.2 Renormierte Spinwellentheorie

Die Divergenz, welche die Standard-Spinwellenreihe in erster Ordnung für  $\Delta m^{(1)}$  zeigt (s. auch Abb. 5.2a weiter unten), hat ihre Ursache, wie bei der Herleitung von Gl. (4.36) klar wurde, in den Termen mit zwei Boseoperatoren, die nach der Normalordnung aus  $V_{\text{DM}}$  entstehen. Um die Divergenz zu vermeiden dürfen diese Terme nicht mittels Störungsrechnung behandelt werden. Da man quadratische bosonische Systeme immer exakt lösen kann, bietet es sich an, diese Terme mit den anderen quadratischen Anteilen (aus  $H_0$ ) zusammen zu diagonalisieren. Diese Vorgehensweise führt zur Renormierung des Quasiteilchen-Anregungsspektrums und zu einer Umgruppierung der Terme der normalen Spinwellenreihe. Während dort die Terme nach Potenzen von  $1/s$  geordnet sind, werden hier einige dieser Terme, nämlich die, welche aus den quadratischen Anteilen von  $V_{\text{DM}}$  stammen, exakt aufsummiert. Der kleine Parameter der Störungsrechnung ist jetzt also nicht mehr proportional zu  $1/s$ , sondern ein formaler Parameter  $\lambda$  vor dem normalgeordneten Term mit vier Bosonen ( $V_{\text{DM}}^{(4)}$ ). Für das einfache quadratische Gitter ( $J' = 1$ ) wurde diese Rechnung in [81] durchgeführt, für das  $J_1$ - $J_2$ -Modell in [83].

Konkret erfolgt die Umordnung der Reihe wie folgt: Die Terme  $H_0$  und  $V_{\text{DM}}$  des bosonischen Hamiltonoperators in der normalen SWT ( $H = E_0 + H_0 + V_{\text{DM}}$ , s. Gl. (4.22)) werden normalgeordnet und ihre Terme nach der Anzahl der Boseoperatoren gruppiert (s. auch Anhang C). Mit  $H_0 = H_0^{(0)} + H_0^{(2)}$  und Gl. (C.1) folgt

$$H = \underbrace{E_0 + H_0^{(0)} + V_{\text{DM}}^{(0)}}_E + \underbrace{H_0^{(2)} + V_{\text{DM}}^{(2)}}_{H_{\text{ren}}^{(2)}} + V_{\text{DM}}^{(4)} = E + H_{\text{ren}}^{(2)} + V_{\text{DM}}^{(4)} \quad (4.37)$$

als Ausgangspunkt der sogenannten renormierten Spinwellentheorie (RSWT)<sup>11</sup>. Zunächst wird der bosonische Wechselwirkungsterm  $V_{\text{DM}}^{(4)}$  nicht berücksichtigt (RSWT 0. Ordnung). Die Bogoljubow-Koeffizienten werden so gewählt, daß  $H_{\text{ren}}^{(2)}$  diagonalisiert wird. Dazu wird verlangt, daß der Faktor vor  $\alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+$  verschwindet, also

$$4s \left(1 - \frac{a_2}{s}\right) \left[2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \mu_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^{*2} + v_{\mathbf{k}}^2)\right] - s(1 - J') \left(1 - \frac{a_1}{s}\right) \left[2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + e^{ik_x} u_{\mathbf{k}}^{*2} + e^{-ik_x} v_{\mathbf{k}}^2\right] \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.38)$$

gilt. Diese Gleichung für die  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  unterscheidet sich von der analogen der LSWT (Gl. (4.26)) dadurch, daß sie nicht analytisch lösbar ist ( $a_1$  und  $a_2$  hängen von den  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  ab, s. Gl. (C.2)). Man erhält eine selbstkonsistente Gleichung, die iterativ gelöst werden muß. Aufgrund formaler Analogien wird die Methode auch als Molekularfeldnäherung („mean-field approximation“) bezeichnet.<sup>12</sup>

Die Lösung der Gl. (4.38) führt zu formal gleichen Ausdrücken wie bei der LSWT, wobei aber die Bindungen *renormiert* werden:  $(1 - J') \rightarrow (1 - J')Z$ . Die implizite Gleichung für den Renormierungsfaktor  $Z$  lautet

$$Z = \frac{s - a_1}{s - a_2}, \quad (4.39)$$

wobei

$$a_1 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - \mu_{\mathbf{k}} \cos k_x}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad a_2 = -\frac{1}{2}(1 - \kappa) + \kappa a_1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (4.40)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{(1 - \mu_{\mathbf{k}}^2) - 2\kappa(1 - \mu_{\mathbf{k}} \cos k_x)}, \quad \kappa = (1 - J') \frac{Z}{4} = \kappa_0 Z. \quad (4.41)$$

Damit ergibt sich für die Bogoljubow-Koeffizienten

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1 - \kappa + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}}, \quad x_{\mathbf{k}} \equiv -\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{\mu_{\mathbf{k}} - \kappa e^{ik_x}}{(1 - \kappa + \varepsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (4.42)$$

und  $H_{\text{ren}}^{(2)}$  ist diagonalisiert,

$$H_{\text{ren}}^{(2)} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}), \quad E_{\mathbf{k}} = 4s \left(1 + \frac{-2a_2}{2s}\right) \varepsilon_{\mathbf{k}}. \quad (4.43)$$

Der Faktor  $-2a_2$  in den Anregungen  $E_{\mathbf{k}}$  ist analog zu der Korrektur von Oguchi [76]. Für die Grundzustandsenergie und die Untergitter-Magnetisierung ergibt sich für die RSWT in 0. Ordnung

$$E = -2N(1 - \kappa Z)(s - a_2)^2, \quad m = s + \frac{1}{2} - \frac{1 - \kappa}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (4.44)$$

<sup>11</sup>Die so definierte RSWT ist auch äquivalent zu der verbesserten SWT von Takahashi [78].

<sup>12</sup>Der bosonische Wechselwirkungsterm  $V_{\text{DM}}$  wird durch einen wechselwirkungsfreien quadratischen Anteil (ein „mittleres Feld“) angenähert, dessen „Stärke“ (also  $a_1$  und  $a_2$ , s. Gl. (4.38)) sich erst durch Lösen des so angenäherten Hamiltonoperators  $H$  (der auch  $a_1$  und  $a_2$  enthält) ergibt.

Abgesehen von  $E$  und der Korrektur in  $E_{\mathbf{k}}$  sind alle diese Gleichungen von der Form her identisch mit denen der LSWT, wobei lediglich  $\kappa_0$  durch  $\kappa = \kappa_0 Z$  ersetzt wurde. Der Ausdruck für die Grundzustandsenergie  $E$  in (4.44) ist dagegen völlig identisch mit dem entsprechenden der SWT 1. Ordnung in (4.33). Für  $J' \neq 1$  ist jedoch der Wert der Energie hier ein anderer, da die Koeffizienten  $a_1$  und  $a_2$  in der RSWT für diesen Fall andere Werte als in der SWT 1. Ordnung haben.

### 4.2.3 Renormierte Spinwellentheorie 2. Ordnung

Der Term  $V_{\text{DM}}^{(4)}$  soll nun mittels der Störungstheorie behandelt werden. Da er normalgeordnet ist, verschwinden die Korrekturen 1. Ordnung zur Grundzustandsenergie und Magnetisierung. Das ist leicht einzusehen, denn für  $\Delta E^{(1)}$  benötigt man Terme ohne Bosonen, für  $\Delta m^{(1)}$  quadratische Terme. Diese Terme wurden aber in der RSWT bereits in der 0. Ordnung berücksichtigt, und sind in  $V_{\text{DM}}^{(4)}$  nicht mehr enthalten. Deshalb wird gleich die Störungstheorie in 2. Ordnung behandelt.

#### Grundzustandsenergie

Die Korrektur 2. Ordnung der Grundzustandsenergie von  $H_{\text{ren}}^{(2)} + V_{\text{DM}}^{(4)}$  ist durch

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | V_{\text{DM}}^{(4)} | n \rangle \langle n | V_{\text{DM}}^{(4)} | 0 \rangle}{\mathcal{E}_n} \quad (4.45)$$

gegeben, wobei  $|n\rangle$  der Eigenzustand von  $H_{\text{ren}}^{(2)}$  zum Eigenwert  $\mathcal{E}_n$  ist (dabei ist  $\mathcal{E}_0 = 0$ ). Der einzige Term von  $V_{\text{DM}}^{(4)}$ , der  $\langle n | V_{\text{DM}}^{(4)} | 0 \rangle \neq 0$  bewirkt, ist  $V^{(7)} \alpha_1^+ \alpha_2^+ \beta_3^+ \beta_4^+$  (s. Gl. (C.5)). Damit ergibt sich als Ansatz für  $|n\rangle$

$$|n\rangle = (1/2) \alpha_5^+ \alpha_6^+ \beta_7^+ \beta_8^+ |0\rangle$$

(1/2 ist ein Normierungsfaktor) mit dem Eigenwert  $\mathcal{E}_n = E_5 + E_6 + E_7 + E_8$  (mit den  $E_{\mathbf{k}}$  nach Gl. (4.43)). Mit (C.5) folgt

$$\begin{aligned} \langle n | V_{\text{DM}}^{(4)} | 0 \rangle &= \frac{1}{2} \left( -\frac{2}{N} \right) \sum_{1-4} \Delta(1+2-3-4) V^{(7)}(1234) \langle 0 | \alpha_5 \alpha_6 \beta_7 \beta_8 \alpha_1^+ \alpha_2^+ \beta_3^+ \beta_4^+ | 0 \rangle \\ &= 4 \frac{1}{2} \left( -\frac{2}{N} \right) \Delta(5+6-7-8) V^{(7)}(5678), \quad \text{und analog} \\ \langle 0 | V_{\text{DM}}^{(4)} | n \rangle &= 4 \frac{1}{2} \left( -\frac{2}{N} \right) \Delta(5+6-7-8) V^{(8)}(7856), \end{aligned}$$

und damit für die Korrektur 2. Ordnung zur Grundzustandsenergie

$$\Delta E^{(2)} = - \left( \frac{4}{N} \right)^2 \sum_{1-4} \Delta(1+2-3-4) \frac{V^{(7)}(1234) V^{(8)}(3412)}{E_1 + E_2 + E_3 + E_4}. \quad (4.46)$$

Die Vertex-Funktionen  $V^{(7)}$  und  $V^{(8)}$  sind im Anhang C definiert.

#### Untergitter-Magnetisierung

Eine Möglichkeit um  $\Delta m^{(2)}$ , die Korrektur 2. Ordnung zur Untergitter-Magnetisierung zu finden, ist die Einführung eines „staggered“ magnetischen Feldes<sup>13</sup>  $h$  [83].

<sup>13</sup>Das Feld wirkt also für die Spins der beiden Untergitter  $A$  und  $B$  in jeweils entgegengesetzter Richtung.

Ausgehend von (4.37) ist der Hamiltonoperator mit Feld durch

$$H(h) = H - hNm \equiv E_0(h) + H_{\text{ren}}^{(2)}(h) + V_{\text{DM}}^{(4)} \quad (4.47)$$

gegeben, wobei für die Untergitter-Magnetisierung  $m = \frac{1}{2} \frac{2}{N} (\sum_{i \in A} s_i^z - \sum_{j \in B} s_j^z)$

$$m = s - \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \frac{1-\kappa}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} \left[ (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) - 2u_{\mathbf{k}}^2 (x_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ + h.c.) \right] \quad (4.48)$$

gilt. Mit der neuen Basis  $H_{\text{ren}}^{(2)}(h)$  lautet die Korrektur 2. Ordnung zur Grundzustandsenergie

$$\Delta E^{(2)}(h) = - \sum_{n_h} \frac{\langle 0_h | V_{\text{DM}}^{(4)} | n_h \rangle \langle n_h | V_{\text{DM}}^{(4)} | 0_h \rangle}{\mathcal{E}_{n_h}}, \quad (4.49)$$

wobei die  $|n_h\rangle$  Eigenzustände von  $H_{\text{ren}}^{(2)}(h)$  mit vier Bosonen sind.

Um  $\Delta m^{(2)}$  (also ohne Feld) zu bekommen, wird das Hellmann-Feynman-Theorem [49] auf Gl. (4.47) angewendet und dann Gl. (4.49) verwendet,

$$\Rightarrow \Delta m^{(2)} = - \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \Delta E^{(2)}(h) |_{h=0}. \quad (4.50)$$

Man benötigt also nur genau die  $O(h)$ -Terme (d.h. die Terme, die linear in  $h$  sind) aus  $\Delta E^{(2)}(h)$ , der weitere Einfluß des Feldes  $h$  wirkt sich nicht auf das Ergebnis für  $\Delta m^{(2)}$  aus. Im weiteren werden die Terme des Zählers und des Nenners von Gl. (4.49) nach Potenzen von  $h$  geordnet, und dann der Quotient nach  $h$  Taylor-entwickelt, es ist

$$\begin{aligned} \Delta E^{(2)}(h) &\equiv - \sum_{n_h} \frac{a + bh + O(h^2)}{c + dh + O(h^2)} = - \sum_{n_h} \left( \frac{a}{c} - \frac{ad}{c^2} h + \frac{b}{c} h + O(h^2) \right), \\ \Rightarrow \Delta m^{(2)} &= \frac{1}{N} \sum_{n_h} \left( - \frac{ad}{c^2} + \frac{b}{c} \right) \equiv \Delta m_a^{(2)} + \Delta m_b^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Die zwei Anteile,  $\Delta m_a^{(2)}$  und  $\Delta m_b^{(2)}$ , rühren von den  $O(h)$ -Termen des Nenners ( $dh$ ), bzw. des Zählers ( $bh$ ) von Gl. (4.49) her.

Der Anteil  $\Delta m_a^{(2)}$  läßt sich sehr einfach mittels

$$E_{\mathbf{k}}(h) = E_{\mathbf{k}} + (1 - \kappa) \frac{h}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} + O(h^2)$$

berechnen, damit ist

$$\begin{aligned} \Delta m_a^{(2)} &= - \frac{64s}{N^3} \left( 1 + \frac{-2a_2}{2s} \right) (1 - \kappa) \sum_{1-4} \frac{\Delta(1+2-3-4)}{(E_1 + E_2 + E_3 + E_4)^2} \\ &\quad \times V^{(7)}(1234) V^{(8)}(3412) \left( \frac{1}{E_1} + \frac{1}{E_2} + \frac{1}{E_3} + \frac{1}{E_4} \right). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Für den zweiten Anteil ( $\Delta m_b^{(2)}$ ) muß der Zähler von (4.49) analysiert werden. Um  $|n_h\rangle$ , den Eigenzustand von  $H_{\text{ren}}^{(2)}(h) = H_{\text{ren}}^{(2)} - hNm$  zu bestimmen, wird der Einfluß

des Feldes (d.h. des Terms  $hNm$ ) mittels Störungstheorie behandelt. Die 1. Ordnung (Terme mit  $O(h)$ ) ist dabei ausreichend, und man erhält allgemein

$$|n_h\rangle = |n\rangle - hN \sum_{p \neq n} \frac{\langle p|m|n\rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_p} |p\rangle + O(h^2)$$

und damit speziell für die Korrektur zum Grundzustand (mit  $|n\rangle = |0\rangle$ )

$$|0_h\rangle = |0\rangle - 2h \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}^2 x_{\mathbf{k}}}{-2E_{\mathbf{k}}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle + O(h^2). \quad (4.53)$$

Für Vier-Bosonen-Zustände  $|n\rangle$  ist  $\langle p|m|n\rangle$  nur ungleich Null, wenn  $|p\rangle$  ein Zustand mit zwei Bosonen (Anteil  $\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}$  von  $m$ ) oder mit sechs Bosonen (Anteil  $\alpha_{\mathbf{k}}^+\beta_{\mathbf{k}}^+$  von  $m$ ) ist. Beide Fälle können nicht zu den  $O(h)$ -Termen von  $\langle 0_h|V_{\text{DM}}^{(4)}|n_h\rangle$  beitragen, da für sie  $\langle 0|V_{\text{DM}}^{(4)}|p\rangle = 0$  ist. Somit gilt für die Zustände  $|n_h\rangle$  mit vier Bosonen

$$\langle 0_h|V_{\text{DM}}^{(4)}|n_h\rangle = \langle 0_h|V_{\text{DM}}^{(4)}|n\rangle + O(h^2),$$

d.h. es ist hier nicht notwendig, die  $|n_h\rangle$  überhaupt in 1. Ordnung zu berechnen. Damit läßt sich die Rechnung erheblich vereinfachen und man erhält mit (4.53)

$$\begin{aligned} \langle 0_h|V_{\text{DM}}^{(4)}|n_h\rangle \langle n_h|V_{\text{DM}}^{(4)}|0_h\rangle &= \langle 0|V_{\text{DM}}^{(4)}|n\rangle \langle n|V_{\text{DM}}^{(4)}|0\rangle \\ &- 2h \sum_{\mathbf{k}} \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{-2E_{\mathbf{k}}} \left( \langle 0|V_{\text{DM}}^{(4)}|n\rangle x_{\mathbf{k}} \langle n|V_{\text{DM}}^{(4)}\alpha_{\mathbf{k}}^+\beta_{\mathbf{k}}^+|0\rangle + x_{\mathbf{k}}^* \langle 0|\alpha_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}}V_{\text{DM}}^{(4)}|n\rangle \langle n|V_{\text{DM}}^{(4)}|0\rangle \right) + O(h^2) \end{aligned}$$

und daraus schließlich

$$\Delta m_b^{(2)} = \frac{16}{N^3} \sum_{1-4} \frac{\Delta(1+2-3-4)}{E_1 + E_2 + E_3 + E_4} W(1234), \quad (4.54)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } W(1234) \equiv & V^{(7)}(1234) \left[ \frac{u_2^2 x_2^*}{E_2} V^{(5)}(3412) + \frac{u_3^2 x_3^*}{E_3} V^{(2)}(3412) \right] \\ & + V^{(8)}(3412) \left[ \frac{u_1^2 x_1}{E_1} V^{(6)}(1234) + \frac{u_4^2 x_4}{E_4} V^{(3)}(1234) \right]. \end{aligned}$$

### Bemerkungen zur Numerik

Die Ausdrücke für  $\Delta E^{(2)}$  und  $\Delta m^{(2)}$  sind sechsdimensionale Integrale, da die Summe über die vier  $\mathbf{k}$ -Vektoren durch die Kronecker-Funktion zu einer Summe über drei Vektoren reduziert wird, die für jeden Vektor über die zweidimensionale Brillion-Zone des Gitters (2.1) genommen werden muß. Die Integrale wurden mit der Gaußschen Methode (Zwei-Punkt-Formel) berechnet, wobei bis zu  $(2 \times 20)^6 = 4.1\text{Mrd.}$  Punkte berücksichtigt wurden.

### 4.3 Dimerisierte Spinwellentheorie

Den bisherigen Spinwellenrechnungen wurde der Néelzustand oder ein anderer *klassischer* Spinzustand zugrunde gelegt. Die Resultate sind für  $J' \gg 1$ , also im Bereich der Singulett-Formierung (Dimerisierung) nicht besonders gut (s. unten im Kapitel 5), da dort die Quantenfluktuationen besonders stark sind, und der klassische Grundzustand sehr weit vom quantenmechanischen entfernt ist, d.h. die klassische Ordnung des Systems im quantenmechanischen Fall nicht mehr zu erkennen ist. Eine Theorie, die von kleinen quantenmechanischen Abweichungen vom klassischen Zustand ausgeht, muß in diesem Bereich versagen.

Hier wird deshalb eine Spinwellenrechnung durchgeführt, bei der der Valence-Bond-Zustand, also der exakte Grundzustand des  $J$ - $J'$ -Modells bei  $J' \rightarrow \infty$ , zugrunde gelegt wurde.<sup>14</sup>

Ausgangspunkt sind die vier quantenmechanischen Eigenzustände eines Systems mit zwei Spins ( $\mathbf{s}_1$  und  $\mathbf{s}_2$ ). Unter Verwendung von  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  für die Spin-up- und Spin-down-Zustände eines einzelnen Spins folgt für diese vier Zustände

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |3\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (4.55)$$

Dabei sind  $|0\rangle$  der Singulett-Zustand und  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  und  $|3\rangle$  die Triplett-Zustände.

Als nächstes wird eine Matrix-Darstellung eingeführt [87, 88] und jeder der vier Eigenzustände durch einen Spaltenvektor, der nur jeweils ein Element ungleich Null enthält, beschrieben. Man kann dann die Operatoren  $A_{ij}$  definieren, die durch  $4 \times 4$ -Matrizen dargestellt werden, konkret gelte mit den Eigenzuständen aus (4.55)

$$\langle i'|A_{ij}|j'\rangle = \delta_{i'v}\delta_{jj'}, \quad \Rightarrow |i\rangle = A_{ij}|j\rangle, \quad (4.56)$$

d.h. die Operatoren wandeln die Zustände ineinander um. Die  $A_{ij}$  lassen sich durch die ursprünglichen Spinoperatoren ausdrücken und hängen nichtlinear von ihnen ab, so ist zum Beispiel

$$A_{00} = \frac{1}{4} - \mathbf{s}_1\mathbf{s}_2, \quad A_{01} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(s_1^- - s_2^-)(s_1^z + s_2^z).$$

Es sind zusammengesetzte Operatoren, sie enthalten also Komponenten beider Einzelspins. Es läßt sich zeigen [87, 88], daß die  $A_{ij}$  die folgende Pseudo-Spinalgebra erfüllen,

$$[A_{ij}, A_{kl}]_- = A_{il}\delta_{jk} - A_{kj}\delta_{li}, \quad (4.57)$$

die Operatoren  $A_{ij}$  werden deshalb auch als *Pseudo-Spinoperatoren* bezeichnet. Man kann die einzelnen Spinoperatoren natürlich auch in Abhängigkeit von den  $A_{ij}$  darstellen, es folgt [87]

$$\begin{aligned} s_1^z &= \frac{1}{2}(A_{02} + A_{20} + A_{11} - A_{33}) & s_2^z &= \frac{1}{2}(-A_{02} - A_{20} + A_{11} - A_{33}) \\ s_1^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_{30} - A_{01} + A_{21} + A_{32}) & s_2^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_{01} - A_{30} + A_{21} + A_{32}) \\ s_1^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_{03} - A_{10} + A_{12} + A_{23}) & s_2^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_{10} - A_{03} + A_{12} + A_{23}). \end{aligned} \quad (4.58)$$

<sup>14</sup>Eine solche Rechnung wurde für ein System aus zwei gekoppelten quadratischen Schichten in [86] durchgeführt. Der dort verwendete Formalismus ist aber etwas anders, als der hier verwendete.

Die Annahme, die den weiteren Betrachtungen zugrunde liegt, besteht darin, daß sich die Dimerisierung der beiden Spins  $\mathbf{s}_1$  und  $\mathbf{s}_2$  besser und auf natürlichere Weise mit den Pseudo-Spinoperatoren beschreiben läßt, als mit den Einzel-Spinoperatoren.

Als nächstes soll deshalb der Hamiltonoperator (2.1) des  $J$ - $J'$ -Modells in Abhängigkeit von den Pseudo-Spinoperatoren dargestellt werden. Da die Dimerisierung der Spinpaare, die mit  $J'$  koppeln, studiert werden soll, müssen für jedes dieser Spinpaare die entsprechenden Operatoren  $A_{ij}$  nach Gl. (4.58) eingesetzt werden. Aus diesem Grunde ist es zweckmäßig, im Hamiltonoperator nicht mehr über die Gitterplätze (also die einzelnen Spins) zu summieren, sondern über die Paare die mit  $J'$  koppeln. Sei der Index eines solchen Paares  $r$  so folgt mit

$$\begin{aligned} \text{Untergitter } A : \mathbf{s}_i &\rightarrow \mathbf{s}_1(r), \\ \text{Untergitter } B : \mathbf{s}_{i+p} &\rightarrow \mathbf{s}_2(r+p-pJ') \end{aligned}$$

für den Hamiltonoperator des  $J$ - $J'$ -Modells

$$\hat{H} = \sum_r \left[ J' \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r) + \sum_{\substack{p \\ p \neq pJ'}} \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r+p-pJ') \right]. \quad (4.59)$$

Die Zuordnung der Spins  $\mathbf{s}_1$  bzw.  $\mathbf{s}_2$  zu den Spins der Untergitter  $A$  bzw.  $B$  beinhaltet eine Vorzeichenkonvention für den Singulett-Zustand  $|0\rangle$  in (4.55) dahingehend, daß hier das Vorzeichen von  $|0\rangle$  (welches grundsätzlich beliebig sein könnte) für jedes Spinpaar, das mit  $J'$  koppelt, gleich gewählt wird.

Mit (4.58) ergibt sich für die einzelnen Terme dieses Hamiltonoperators

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r) &= 1/4 - A_{00}^r \\ \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r') &= \frac{1}{4} [(A_{02}^r + A_{20}^r + A_{11}^r - A_{33}^r)(-A_{02}^{r'} - A_{20}^{r'} + A_{11}^{r'} - A_{33}^{r'}) \\ &\quad + (A_{03}^r - A_{10}^r + A_{12}^r + A_{23}^r)(A_{01}^{r'} - A_{30}^{r'} + A_{21}^{r'} + A_{32}^{r'}) \\ &\quad + (A_{30}^r - A_{01}^r + A_{21}^r + A_{32}^r)(A_{10}^{r'} - A_{03}^{r'} + A_{12}^{r'} + A_{23}^{r'})] \end{aligned} \quad (4.60)$$

(mit  $r \neq r'$ ). Mit diesen Ausdrücken ist Gl. (4.59) eine *exakte* Darstellung des  $J$ - $J'$ -Modells mittels der Pseudo-Spinoperatoren  $A_{ij}$ .

Durch eine Dyson-Maleev-Transformation [88]

$$\begin{aligned} A_{00} &= 1 - a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2 - a_3^+ a_3, \\ A_{l0} &= a_l^+ A_{00}, \quad A_{0l} = a_l, \quad A_{lm} = a_l^+ a_m; \quad \text{mit } l, m = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (4.61)$$

können die Pseudo-Spinoperatoren durch Boseoperatoren ( $a_l^+$ ,  $a_l$ ) ausgedrückt werden. Dabei bleiben die Vertauschungsrelationen (4.57) für die  $A_{ij}$  erhalten. Der Singulett-Zustand  $|0\rangle$  aus (4.55) ist der bosonische Vakuumzustand, d.h. es ist  $a_l|0\rangle = 0$ , die Bosonen beschreiben also die Abweichungen vom Singulett-Zustand, welcher sozusagen der Modellzustand dieser Spinwellenrechnung ist.

Nun wird (4.60) mit (4.61) verwendet und es folgt (mit  $a \equiv a_1$ ,  $b \equiv a_2$ ,  $c \equiv a_3$ )

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r) &= -\frac{3}{4} + a_r^+ a_r + b_r^+ b_r + c_r^+ c_r, \\ \mathbf{s}_1(r) \mathbf{s}_2(r') &= \frac{1}{4} [-b_r b_{r'} - b_r b_{r'}^+ + (c_r - a_r^+)(a_{r'} - c_{r'}^+) + \text{h.c.}] + V, \end{aligned} \quad (4.62)$$

wobei  $V$  die bosonischen Wechselwirkungsterme (das sind hier Produkte mit drei bis sechs Boseoperatoren) enthält.

Im weiteren werden diese Wechselwirkungsterme vernachlässigt, und (4.62) eingesetzt in Gl. (4.59) ergibt den Hamiltonoperator des  $J$ - $J'$ -Modells in einer *linearen* Spinwellennäherung. Die Magnonen („Spinwellen“) stellen in dieser Näherung die Abweichungen vom Valence-Bond-Zustand, dem Eigenzustand des Modells bei  $J' \rightarrow \infty$ , dar.

Der Hamiltonoperator wird in der üblichen Weise einer Fourier-Transformation

$$a_r = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}r} a_{\mathbf{k}}$$

(und analog für  $b_r$  und  $c_r$ ) unterzogen, es folgt

$$H = -\frac{3}{8}NJ' + \sum_{\mathbf{k}} (J' - \frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}})) [a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ c_{-\mathbf{k}}^+) + B_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+], \quad (4.63)$$

mit

$$\nu_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{p \neq p'} e^{-i\mathbf{k}(p-p')} = e^{2ik_x} + e^{i(k_x - k_y)} + e^{i(k_x + k_y)},$$

$$A_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}})}{J' - \frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}})}, \quad B_{\mathbf{k}} \equiv \frac{-\frac{1}{4}\nu_{\mathbf{k}}}{J' - \frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}})}.$$

Mit zwei Bogoljubow-Transformationen kann der Hamiltonoperator nun diagonalisiert werden, dabei ist konkret

$$a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{k}}(a_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^+ c_{-\mathbf{k}}^+) \rightarrow \omega_{\mathbf{k}}^A (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}}^+ \gamma_{\mathbf{k}} + 1) - 1, \quad \omega_{\mathbf{k}}^A = \sqrt{1 - A_{\mathbf{k}}^2},$$

$$\sum_{\mathbf{k}} [b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}}^+ b_{-\mathbf{k}}^+] \rightarrow \sum_{\mathbf{k}} [\omega_{\mathbf{k}}^B (\beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} + 1/2) - 1/2], \quad \omega_{\mathbf{k}}^B = \sqrt{1 - 4|B_{\mathbf{k}}|^2},$$

und für die Grundzustandsenergie folgt

$$E = -\frac{3}{8}NJ' + \sum_{\mathbf{k}} \left( J' - \frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}}) \right) \left( \omega_{\mathbf{k}}^A + \frac{1}{2}\omega_{\mathbf{k}}^B - \frac{3}{2} \right). \quad (4.64)$$

Der Term  $-3/8NJ'$  ist die Energie des vollständig dimerisierten Valence-Bond-Zustandes, d.h. die Energie der  $N/2$  Singulets, die sich aus den mit  $J'$  koppelnden Spinpaaren gebildet haben.

Für hinreichend große Werte von  $J'$  sind die Anregungsenergien  $\omega_{\mathbf{k}}^A$  und  $\omega_{\mathbf{k}}^B$  reell (was Stabilität andeutet), und es gibt ein endliches Gap in den Spektren, dessen Minimum bei  $\mathbf{k} = (0, 0)$  liegt. Für diese niedrigste Energieanregung folgt

$$\Delta = \left( J' - \frac{1}{2}\Re(\nu_{\mathbf{k}}) \right) \omega_{\mathbf{k}}^A \Big|_{\mathbf{k}=(0,0)} = \sqrt{J'(J' - 3)}, \quad \text{bei } J' \geq 3 \quad (4.65)$$

(gleiches Resultat mit den Anregungen der  $\beta_{\mathbf{k}}$ ). Dieses Gap verschwindet bei einem kritischen Wert von  $J'_s = 3$ . Bei  $J' < 3$  werden die Anregungen in der Nähe von

$\mathbf{k} = (0, 0)$  rein imaginär, sie sind also instabil, und die Methode kann nicht mehr verwendet werden.

Für das Gap nach (4.65) kann man auch  $\Delta = J' \sqrt{\varepsilon}$  mit  $\varepsilon = (J' - 3)/J'$  schreiben, damit ergibt sich für den kritischen Exponenten von  $\Delta$  der Wert  $1/2$ . Das gleiche kritische Verhalten wurde für ein System mit zwei kurzreichweitig gekoppelten Lieb-Mattis-Antiferromagneten (also mit langreichweitiger Wechselwirkung *innerhalb* der beiden Antiferromagnete) gefunden [22].

## 4.4 Einfache Variationsrechnung

Im  $J$ - $J'$ -Modell gibt es im Gebiet starker antiferromagnetischer  $J'$ -Bindungen ( $J' \gg 1$ ) die Tendenz zur Singulett-Formierung der mit  $J'$  koppelnden Paare von Spins. Bei  $J' \rightarrow \infty$  ist schließlich der Grundzustand des Modells ein *Valence-Bond*-Zustand, d.h. ein Produktzustand aller Singulett-Paare, die sich aus den Spins, die mit  $J$  wechselwirken, gebildet haben.

Mit der folgenden einfachen Variations-Wellenfunktion wird der Übergang vom Néelzustand zu diesem Valence-bond-Zustand durch einen Parameter beschrieben. Der Ansatz, der in einer ähnlichen Form bereits für ein Spinsystem mit zwei Schichten verwendet wurde [22], lautet konkret

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \prod_{i \in A} \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} [|\uparrow_i \downarrow_{i+\hat{x}}\rangle - t |\downarrow_i \uparrow_{i+\hat{x}}\rangle]. \quad (4.66)$$

Die Gitterplätze  $i$  und  $i + \hat{x}$  korrespondieren zu einer  $J'$ -Bindung, d.h. das Produkt in Gl. (4.66) wird über alle  $J'$ -Bindungen des  $J$ - $J'$ -Modells genommen. Die Wellenfunktion hängt von dem Variationsparameter  $t$  ab und ist eine Interpolation zwischen dem Valence-Bond-Zustand, welcher bei  $t = 1$  realisiert ist und dem Néelzustand bei  $t = 0$ . Damit ist  $|\Psi_{\text{var}}\rangle$  mit  $t = 1$  ein Eigenzustand des Modells für den Grenzfall  $J' \rightarrow \infty$ , die Ergebnisse mit dem Ansatz (4.66) sollten also für größere Werte von  $J'$  immer besser werden.

Es wird das übliche Variationsverfahren durchgeführt (Ritzsches Variationsverfahren), d.h. der Erwartungswert  $\langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle$  des Hamiltonoperators (2.1) mit der normierten Wellenfunktion  $|\Psi_{\text{var}}\rangle$ , also

$$\frac{1}{N} \langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle = -\frac{1}{8} J' - \frac{1}{2} J' \frac{t}{1+t^2} - \frac{3}{8} \left( \frac{1-t^2}{1+t^2} \right)^2$$

wird in bezug auf den Parameter  $t$  minimiert. Damit folgt für  $t$  im variationellen Grundzustand

$$t = \begin{cases} 1/J'(3 - \sqrt{9 - J'^2}) & J' \leq 3 \\ 1 & J' > 3 \end{cases}.$$

In dieser variationellen Näherung ist also die Singulett-Formierung bereits bei  $J' \geq 3$  vollständig, und der Grundzustand wird ein Valence-Bond-Zustand ( $t = 1$ ).

Für die variationelle Grundzustandsenergie, die als solche eine *obere Grenze* für die Grundzustandsenergie des  $J$ - $J'$ -Modells darstellt, ergibt sich entsprechend

$$E_{\text{var}}/N = \begin{cases} -(J'^2 + 3J' + 9)/24 & J' \leq 3 \\ -3J'/8 & J' > 3 \end{cases} . \quad (4.67)$$

Der relevante Ordnungsparameter für die Beschreibung der Néelordnung ist durch

$$m_{\text{var}} = \langle \Psi_{\text{var}} | s_i^z | \Psi_{\text{var}} \rangle = \begin{cases} 1/2\sqrt{1 - J'^2/9} & J' \leq 3 \\ 0 & J' > 3 \end{cases} \quad (4.68)$$

gegeben. Er zeigt ein Zusammenbrechen der Néelordnung bei einem kritischen Wert von  $J'_s = 3$  an.

Für  $J' \leq 3$  läßt sich mit  $\varepsilon = (3 - J')/J'$  für die Energie und den Ordnungsparameter

$$E_{\text{var}}/N = -\frac{3J'}{8} - \frac{J'^2}{24}\varepsilon^2 \quad \text{bzw.} \quad m = \frac{1}{6}\sqrt{(3 + J')J'}\sqrt{\varepsilon}$$

schreiben. Das kritische Verhalten der Energie ist typisch für einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Die Magnetisierung zeigt einen kritischen Exponenten von  $1/2$ .

## 4.5 Exakte Diagonalisierung

Bei der Methode der exakten Diagonalisierung (ED) werden der Grundzustand und die niedrigste Anregung kleiner Gitter des  $J$ - $J'$ -Modells mit einer endlichen Anzahl ( $N$ ) von Spins exakt bestimmt. Da die ED-Berechnungen nicht vom Autor dieser Dissertation durchgeführt wurden,<sup>15</sup> wird die Methode hier nur kurz skizziert (s. [89, 90] für Einzelheiten und weitere Referenzen).

Grundsätzlich hat der Hilbertraum des Problems  $2^N$  Dimensionen, d.h. von einer Matrix dieser Dimension müssen die kleinsten Eigenwerte bestimmt werden. Für den Grundzustand (i.allg. ein Singulett mit  $s_T = 0$ ) und die niedrigste Anregung (i.allg. ein Tripletzustand mit  $s_T = 1$ ) kann man sich auf den Unterraum mit  $s_T^z = 0$  beschränken. Damit wird die Dimension der Matrix verringert. Eine weitere Verringerung ist durch Berücksichtigung aller möglichen Gittersymmetrien möglich. Die kleinsten Eigenwerte der Matrix werden schließlich mit dem Lanczos-Algorithmus bestimmt.

Unter Verwendung von periodischen Randbedingungen werden endliche Gitter mit einer quadratischen Form mit  $N = 16, 18, 20, 26$  und  $32$  Spins exakt diagonalisiert (s. auch Tab. 4.1). Unter Verwendung von Skalierungsgesetzen („finite-size scaling“) für das quadratische Gitter [91, 92] werden die Ergebnisse für die endlichen Gitter auf das unendliche System extrapoliert. Die dafür verwendeten Skalierungsgesetze sind für die Grundzustandsenergie

$$E/N = E_{\infty}/N + \text{const} \times N^{-3/2}, \quad (4.69)$$

---

<sup>15</sup>Die Ergebnisse der ED-Berechnungen wurden dem Autor von J. Schulenburg zur Verfügung gestellt.

Tabelle 4.1: Die Randvektoren („edge-vectors“) der einzelnen Gitter, die hier bei der exakten Diagonalisierung verwendet werden. Die Notation und weitere Einzelheiten sind in [90] beschrieben.

Bezeichnung	Randvektoren
C16q0	$\{(4, 0), (0, 4)\}$
C18t3	$\{(3, 3), (-3, 3)\}$
C20d4	$\{(4, 2), (-2, 4)\}$
C26h5	$\{(5, 1), (-1, 5)\}$
C32q4	$\{(4, 4), (-4, 4)\}$

für die Untergitter-Magnetisierung  $M_s(\infty)$  wird der antiferromagnetische Strukturfaktor  $M_s^2$  extrapoliert,

$$M_s^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} (-1)^{i+j} \langle \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \rangle = M_s(\infty)^2 + \text{const} \times N^{-1/2} \quad (4.70)$$

und für die Energielücke (gap) zwischen der Energie der niedrigsten Anregung und der des Grundzustandes gilt

$$\Delta = \Delta_\infty + \text{const} \times N^{-1}. \quad (4.71)$$

# Kapitel 5

## Resultate und Vergleich

In diesem Kapitel werden die einzelnen Resultate für das  $J$ - $J'$ -Modell mit dem Hamiltonoperator (2.1) präsentiert, die unter Verwendung der verschiedenen Methoden, die in den vorherigen Kapiteln 3 und 4 dargestellt sind, erhalten wurden. Die Auswertung der Ergebnisse steht dabei unter zwei Gesichtspunkten. Zum einen sollen Aussagen über die Physik des  $J$ - $J'$ -Modells getroffen werden, wobei ein besonderes Augenmerk auf die Phasenübergänge gelegt wird. Damit diese Aussagen möglichst verlässlich sind, werden die Ergebnisse der verschiedenen Methoden verglichen. Mit diesem Vergleich sollen aber zum anderen auch Einschätzungen über die Güte der einzelnen Methoden in bestimmten Phasen des Modells gemacht werden.

Die Einteilung der einzelnen Abschnitte dieses Kapitels erfolgt nach dem Wert des Modellparameters  $J'$  und damit nach den unterschiedlichen physikalischen Prozessen, die im Modell auftreten.

### 5.1 $J' > 0$ – Bildung von lokalen Singulettts

In diesem Bereich gibt es keine Frustration, da beide Arten von nächsten-Nachbar-Bindungen im Gitter antiferromagnetisch sind. Es kommt jedoch (konkret bei  $J' \gg 1$ ) zur Bildung von lokalen Singulettts zwischen den Spins, die mit  $J'$  koppeln, und damit zur Zerstörung der langreichweitigen Néelordnung.

#### 5.1.1 Phasenübergang zur dimerisierten Phase

Das einfache quadratische Gitter (d.h. bei  $J' = 1$ ) zeigt langreichweitige Néel-artige Ordnung im quantenmechanischen Grundzustand. Diese Ordnung bleibt zunächst auch für größeres  $J'$  bestehen, schließlich gibt es aber (mit allen verwendeten Methoden) klare Anzeichen für einen Phasenübergang zweiter Ordnung zu einer ungeordneten dimerisierten Phase. Der Übergang findet bei einem bestimmten kritischen Wert von  $J'$ , der hier mit  $J'_s$  bezeichnet wird, statt. Für  $J' > J'_s$  ist die Néel-artige langreichweitige Ordnung zerstört, d.h. die Untergitter-Magnetisierung  $m$ , die diese

Ordnung beschreibt, ist gleich Null.

### Untergitter-Magnetisierung

Der Wert von  $J'$ , an dem die Magnetisierung  $m(J')$  Null wird, ist also genau der Phasenübergangspunkt  $J'_s$ . Die auf diese Weise (mit den einzelnen Methoden) erhaltenen Werte von  $J'_s$  sind in Tab. 5.1 angegeben. Dabei zeigen sich große Unterschiede, insbesondere in den verschiedenen Ordnungen der Standard-Spinwellennäherungen (SWT, RSWT) und zwischen diesen Spinwellen-Ergebnissen einerseits und den Resultaten der weiteren Methoden andererseits.

Tabelle 5.1: Untergitter-Magnetisierung  $m$  des  $J$ - $J'$ -Modells bei verschiedenen Werten von  $J'$  und kritischer Wert  $J'_s$  (Phasenübergangspunkt zur dimerisierten Phase); Vergleich der Resultate der einzelnen Methoden (in unterschiedlichen Näherungsordnungen).

Methode	$m$ bei			$J'_s$
	$J' = 1$	$J' = 2$	$J' = 3$	
LSWT 1Bos <sup>1)</sup>	0.3034	0.2978	0.2871	58
LSWT	0.3034	0.2872	0.2568	10.6
SWT 1.Ord	0.3034	0.2826	0.2367	6.8
RSWT 0.Ord	0.3034	0.2824	0.2331	5.7
RSWT 2.Ord	0.3056	0.2808	0.2197	5.0
LSUB2	0.4207	0.4000	0.3545	–
SUB2	0.4135	0.3934	0.3488	–
LSUB4	0.3824	0.3528	0.2752	–
LSUB6	0.3636	0.3298	0.2268	–
LSUB8	0.3524	0.3160	0.1913	–
LSUB2-8 <sup>2)</sup>	0.3154	0.2706	0.0799	3.41
LSUB4-8 <sup>2)</sup>	0.3114	0.2654	0.0396	3.16
Variation	0.4714	0.3727	0.0	3.0
Dimer-SWT	–	–	–	3.0
ED	0.2761	0.2244	0.0	2.45

1) Ein-Bosonen-Darstellung, alle anderen Spinwellennäherungen in Zwei-Bosonen-Darstellung

2) extrapolierte CCM-LSUB $n$ -Resultate mit  $n = 2, 4, 6, 8$  (LSUB2-8) bzw. mit  $n = 4, 6, 8$  (LSUB4-8)

Die Abschätzung für  $J'_s$  unter Verwendung der vier extrapolierten CCM-LSUB $n$ -Resultate für  $m$  (s. Gl. (3.36)) mit  $n = 2, 4, 6, 8$  (s. auch Abb. 5.1) ist  $J'_s \approx 3.41$  (LSUB2-8 in Tab. 5.1). Werden dagegen nur die drei LSUB $n$ -Näherungen mit  $n = 4, 6, 8$  verwendet (LSUB4-8 in Tab. 5.1), so erhält man  $J'_s \approx 3.16$ . Das läßt vermuten, daß der wirkliche Wert noch etwas kleiner ist.

Für die einzelnen LSUB $n$ -Näherungen (und SUB2<sup>1)</sup>) ist der Ordnungsparameter

<sup>1</sup>Es ist bemerkenswert, daß die SUB2, welche alle Konfigurationen von zwei Spins in *beliebigem*

für alle Werte  $J' > 0$  größer Null (sein Wert geht aber für große  $J'$  asymptotisch gegen Null), d.h. es gibt insofern keine Anzeichen für einen Phasenübergang. Um das besser zu verstehen, muß etwas darüber gesagt werden, wie Phasenübergänge in der CCM entstehen.

Bei dieser Methode gibt es stets einen endlichen Überlapp zwischen dem Modellzustand  $|\Phi\rangle$  und dem CCM-Grundzustand des Systems  $|\Psi\rangle$ , d.h. wenn mit dieser Methode der *exakte* Grundzustand bestimmt werden soll (i.allg. unmöglich, da der Korrelationsoperator  $S$  dann nicht angenähert werden kann), dann darf  $|\Phi\rangle$  zu diesem nicht orthogonal sein. Für praktische Rechnungen mit approximiertem  $S$  (z.B. LSUB $n$ ) ist es dagegen für gute Resultate nicht *a priori* notwendig, daß es einen endlichen Überlapp zwischen dem Modellzustand und dem exakten Grundzustand gibt,<sup>2</sup> der Modellzustand darf nur nicht zu schlecht sein. Der Modellzustand ist offensichtlich dann zu schlecht, wenn die CCM-Gleichungen zu unphysikalischen Lösungen führen (hier z.B.  $m < 0$  oder  $m > 1/2$ ) und insbesondere, wenn sie nicht mehr konvergieren.<sup>3</sup> Wenn ein solches Verhalten bei der Veränderung eines Systemparameters auftritt, ist das in der CCM ein Anzeichen dafür, daß bei diesem bestimmten Wert des Parameters ein Phasenübergang im realen System auftritt [45].

Im frustrierten Bereich ( $J' < 0$ ) tritt bei Verwendung des Néel-Modellzustandes für Werte von  $J'$  unterhalb eines bestimmten kritischen Wertes (der kleiner als  $J'_c$  ist, s. auch Abschnitt 5.3.2 weiter unten) genau dieser Fall ein, d.h. die CCM-Gleichungen haben unphysikalische Lösungen, und konvergieren schließlich nicht mehr. Wird der Néelzustand durch einen besseren Modellzustand (den helixartigen mit  $\Phi \neq 0$ , konkret  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$ ) ersetzt, konvergieren die Gleichungen wieder.

Für  $J' > 0$  konvergieren die CCM-Gleichungen immer (und haben physikalische Lösungen), d.h. der Phasenübergang zur dimerisierten Phase bei  $J' = J'_s$  ist so nicht zu erkennen. Zwar geht der Überlapp zwischen dem Néelzustand (Modellzustand) und dem dimerisierten Zustand (dem exakten Grundzustand für  $J' > J'_s$ ) mit der Systemgröße  $N$  exponentiell gegen Null,<sup>4</sup> aber der Modellzustand wird offensichtlich nie zu schlecht für die CCM.

Der Unterschied zum frustrierten Bereich könnte darin begründet sein, daß der Überlapp zwischen dem Néelzustand und dem helixartigen Quantenzustand (dem exakten Grundzustand dort) stärker als exponentiell mit  $N$  gegen Null geht, man also vermuten könnte, daß ein Modellzustand, dessen Überlapp mit dem exakten Zustand nicht stärker als exponentiell mit  $N$  gegen Null geht, für die CCM nicht zu schlecht ist. Ein Unterschied zum frustrierten Bereich liegt jedoch auf jeden Fall darin, daß es im Rahmen der hier verwendeten CCM-Erzeugungsoperatoren  $C_I^+$  (also Spinerzeugungsoperatoren) für den dimerisierten Bereich *keinen besseren* Modellzustand gibt. Im Rahmen dieser  $C_I^+$ -Operatoren ist die Menge aller möglichen CCM-Modellzustände

---

Abstand enthält, nahezu die gleichen Ergebnisse für den langreichweitigen Ordnungsparameter wie die LSUB2 liefert.

<sup>2</sup>Einige Größen, die nicht so stark von der Wellenfunktion abhängen (z.B. die Grundzustandsenergie), können auch mit sehr ungenauer Wellenfunktion z.T. noch sehr genau bestimmt werden.

<sup>3</sup>Das heißt hier, daß das Newton-Verfahren zur Lösung der CCM-Gleichungen nicht mehr konvergiert, man also keine Lösungen für die Gleichungen finden kann.

<sup>4</sup>Der Überlapp zwischen dem Néelzustand und dem vollständig dimerisierten Zustand (nach Gl. (4.66) mit  $t = 1$ ) geht beispielsweise mit  $(1/\sqrt{2})^{N/2}$  gegen Null.

durch alle klassischen Spinzustände definiert, d.h. durch alle Zustände bei der jeder Spin eine bestimmte wohldefinierte Quantisierungsachse hat. Für  $J' > 0$  ist nun der Néelzustand nicht nur stets der klassische Grundzustand, sondern auch immer der optimale Modellzustand im Rahmen der hier verwendeten CCM<sup>5</sup> (d.h. es ist immer  $\Phi_{\text{LSUB}n} = 0$ ).

Da es nun aber für  $J' > 0$  im Rahmen einer einzelnen CCM-Näherung keinen Phasenübergang gibt, kann die Untergitter-Magnetisierung  $m$  nicht Null werden. Die Funktion  $m(J')$  muß nämlich (kein Phasenübergang) stetig in allen Ableitungen sein. Damit kann sie nicht ab einem bestimmten kritischen  $J'_s$  Null sein. Würde  $m(J')$  aber (im Einklang mit den Stetigkeitsbedingungen) ab einem bestimmten Wert von  $J'$  negativ werden, so hätte man wiederum unphysikalische Lösungen (mit  $m < 0$ ), die nur auftreten, wenn der Modellzustand zu schlecht ist.

Das Resultat  $m > 0$  für alle  $J' > 0$  ist also im Rahmen der CCM konsistent und bedeutet gerade nicht, daß die dimerisierte Phase schlecht beschrieben wird. Tatsächlich wird  $m(J')$  bei Annäherung an  $J'_s$  schnell kleiner und hat ungefähr am kritischen Wert einen Wendepunkt (bei LSUB8 ist der Wendepunkt beispielsweise bei  $J' \approx 3$ ), um sich von da an asymptotisch dem Wert Null zu nähern.<sup>6</sup> Insofern könnte man auch aus den einzelnen CCM-Näherungen Abschätzungen über  $J'_s$  ablesen.

Das CCM-Ergebnis für  $J'_s$  ist in Übereinstimmung mit dem entsprechenden Resultat, das unter Verwendung der Ergebnisse der exakten Diagonalisierung (ED) von kleinen Systemen gewonnen wurde. Unter Verwendung des Extrapolationsansatzes (4.70) für  $m$  erhält man einen kritischen Wert von  $J'_s \approx 2.45$ . Es ist allerdings zu beachten, daß eine höhere Genauigkeit größere Systeme erfordert. Das ist für die Magnetisierung (und damit für die Abschätzung von  $J'_s$ ) besonders wichtig, da im Extrapolationsansatz die Systemgröße  $N$  in der ersten Ordnung mit  $N^{-1/2}$  eingeht, ein Wert, der nur langsam mit wachsendem  $N$  kleiner wird.<sup>7</sup> Deshalb kann man die ED-Resultate für die Magnetisierung (s. auch Abb. 5.1 und Tab. 5.1) nicht als quantitativ korrekt ansehen.

Die CCM- und ED-Resultate für das kritische  $J'_s$  stimmen auch mit der Abschätzung  $J'_s \approx 2.56$  aus der Reihenentwicklung [51] überein. Etwas überraschend ist, daß auch das Ergebnis  $J'_s = 3$  des einfachen Variationsansatzes aus Abschnitt 4.4 damit gut übereinstimmt. Die dimerisierte SWT liefert den gleichen Wert für  $J'_s$ .

Die Ergebnisse der Standard-SWT für  $J'_s$  weichen z.T. sehr stark von den Ergebnissen der anderen Methoden ab. Zwar zeigen die Resultate mit wachsender Näherungsordnung eine deutliche Verbesserung (s. Tab. 5.1), aber selbst das beste Ergebnis (die renormierte SWT in 2.Ordnung) zeigt mit  $J'_s \approx 5.0$  noch eine deutliche Abweichung von den Resultaten der CCM, von dem Resultat der ED und von dem der

---

<sup>5</sup>Für die dimerisierte Phase gibt es natürlich bessere Modellzustände als den Néelzustand, z.B. einen Singulett-Zustand, wie er auch in der dimerisierte SWT verwendet wurde. Ein solcher Zustand erfordert jedoch andere CCM-Erzeugungsoperatoren (s. dazu [88]) als die hier verwendeten.

<sup>6</sup>In der SWT gibt es keinen Wendepunkt von  $m(J')$ , die Untergitter-Magnetisierung wird einfach bei  $J' > J'_s$  negativ und wird im weiteren immer kleiner (z.B. bei  $J' = 100$  ist  $m \approx -16$  bzw.  $m \approx -52$  mit der SWT 0. bzw. 1. Ordnung).

<sup>7</sup>Die Grundzustandsenergie, für die  $E \propto N^{-3/2}$  gilt (s. auch Gl. (4.69)), läßt sich dagegen viel besser durch Extrapolation der einzelnen ED-Resultate bestimmen.

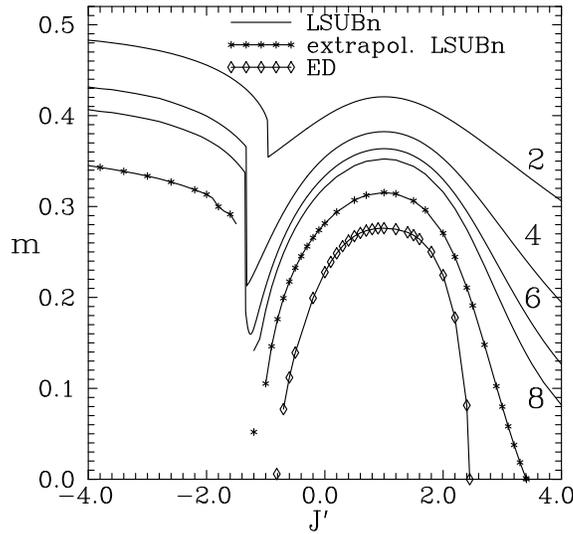


Abbildung 5.1: Magnetischer Ordnungsparameter (nach Gl. (3.36)) für den Grundzustand des  $J$ - $J'$ -Modells in Abhängigkeit von  $J'$  in den verschiedenen  $\text{LSUB}n$ -Näherungen mit Extrapolation. Für das Gebiet der Néelphase werden die Resultate mit dem extrapolierten Resultat der exakten Diagonalisierung (ED, s. Gl. (4.70)) verglichen. Beide Extrapolationen sind in einem Gebiet um  $J' \approx -1$  sehr ungenau. Deshalb werden sie dort durch einzelne Punkte (unter Weglassung der durchgezogenen Linien) dargestellt.

Reihenentwicklung.

Das ist ein Anzeichen dafür, daß eine Spinwellentheorie, die von einem geordneten Zustand ausgeht, nur unzureichend einen Übergang zu einer ungeordneten dimerisierten Phase beschreiben kann. Das wird auch besonders bei der Betrachtung der Ergebnisse für die Grundzustandsenergie für große  $J'$  (also in der dimerisierten Phase, s. unten Tab. 5.2) deutlich, welche *qualitativ* falsch sind. Ein ähnliches Verhalten der SWT konnte auch für einen Heisenberg-Antiferromagneten mit zwei Schichten beobachtet werden [86], wenn man die Kopplung zwischen den Schichten verstärkt, und sich das System damit einer ungeordneten dimerisierten Phase nähert. In [86] wurde argumentiert, daß die Beschreibung mit Spinwellen aufgrund von größeren longitudinalen Spinfluktuationen, die in dieser Phase auftreten, nicht funktioniert.

### Energieanregungs-Gap

Ein weiteres Anzeichen für eine dimerisierte Phase ist das Auftreten einer Lücke  $\Delta$  („Gap“) zwischen der Energie des Grundzustandes und der Energie des niedrigsten angeregten Zustandes. Für einen Néel-artig langreichweitig geordneten Zustand hat man offensichtlich ein Spektrum mit gaplosen Goldstone-Moden, während für einen ungeordneten Singulett-Grundzustand die Bildung einer einzelnen Triplett-Anregung (d.h. die kleinste denkbare Anregung in einem solchen Fall) bereits einen endlichen Energiebetrag kostet. Dieses Verhalten des Energie-Gaps findet man auch für das  $J$ - $J'$ -Modell (s. Abb. 5.3), dabei stimmen die Resultate der CCM und die der exakten Diagonalisierung (ED) gut überein. Für  $J' \gg J'_s$  ist das Gap proportional zu  $J'$ , was

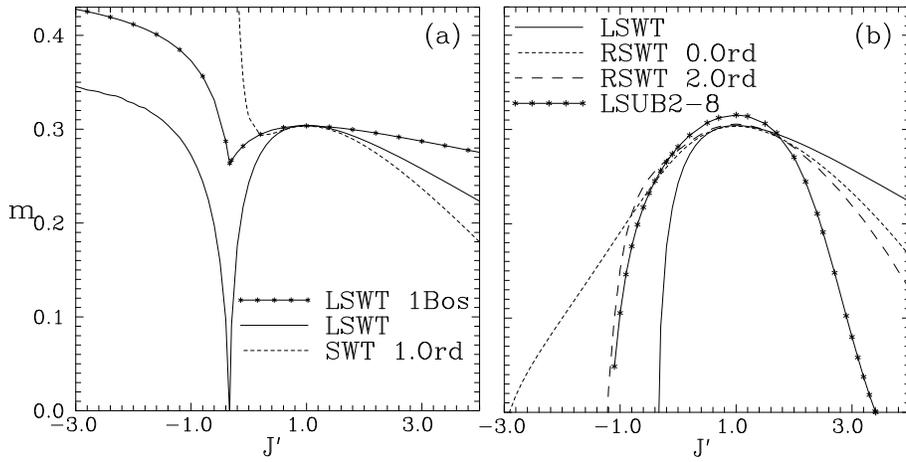


Abbildung 5.2: Magnetischer Ordnungsparameter  $m$  des  $J$ - $J'$ -Modells in Abhängigkeit von  $J'$  bei Verwendung der Spinwellentheorie; (a) Spinwellentheorie in nullter Ordnung (LSWT) in Ein- und Zwei-Bosonen-Darstellung unter Verwendung des helixartigen Grundzustandes und in erster Ordnung (hier nur mit dem Néelzustand); (b) renormierte SWT für die Néelphase im Vergleich zu den entsprechenden Resultaten der LSWT und der extrapolierten LSUB $n$ .

mit der Dimer-artigen Natur des Grundzustandes in diesem Bereich zu tun hat. Das Gap öffnet sich mit beiden Methoden offensichtlich im Bereich  $2.5 \lesssim J'_s \lesssim 3.0$ . Das stimmt mit den entsprechenden Resultaten für das kritische  $J'_s$  unter Verwendung der Untergitter-Magnetisierung (s. oben) überein.

Die kleinen Abweichungen des Gaps vom Wert Null, welche die CCM- und die ED-Resultate im Bereich mit langreichweitiger Ordnung (wo gaplose Anregungen erwartet werden) zeigen, können als ein Maß für die Genauigkeit dieser Methoden und ihrer Extrapolationsansätze interpretiert werden.

Die Resultate der dimerisierten SWT bezüglich des Gaps (s. Gl. (4.65)) stimmen mit denen der CCM und denen der ED für größere Werte von  $J'$  gut überein. Das Resultat nach Gl. (4.65) konvergiert für  $J' \rightarrow \infty$  gegen das exakte Resultat ( $\Delta = J'$ ) für die vollständig dimerisierte Phase, wo die kleinste Anregung genau eine Singulett-Anregung ist. Die Resultate der dimerisierten SWT zeigen für  $J' \lesssim 4$  (s. Abb. 5.3) eine deutliche Abweichung zu den Resultaten der anderen Methoden, da diese lineare SWT, die von dem vollständig dimerisierten Zustand (der hier bei  $J' \rightarrow \infty$  exakt ist) ausgeht, einen Bereich in (oder in unmittelbarer Nähe) der Néelphase nicht gut beschreiben kann.

Auch mittels der SWT (um den Néelzustand) können, falls das Spinwellenspektrum bekannt ist, Aussagen über das Gap getroffen werden. Das trifft hier auf die LSWT und die RSWT in 0. Ordnung zu (die Störungsrechnungen wurden in dieser Arbeit nur für den Grundzustand durchgeführt). Die betreffenden Anregungen  $\varepsilon_{s\mathbf{k}}$  und  $E_{\mathbf{k}}$  (s. Gl. (4.29) bzw. Gl. (4.43)) haben jedoch für alle Werte von  $J'$  bei  $\mathbf{k} = (0, 0)$  den Wert Null. Das bedeutet, daß diese beiden Spinwellennäherungen auch

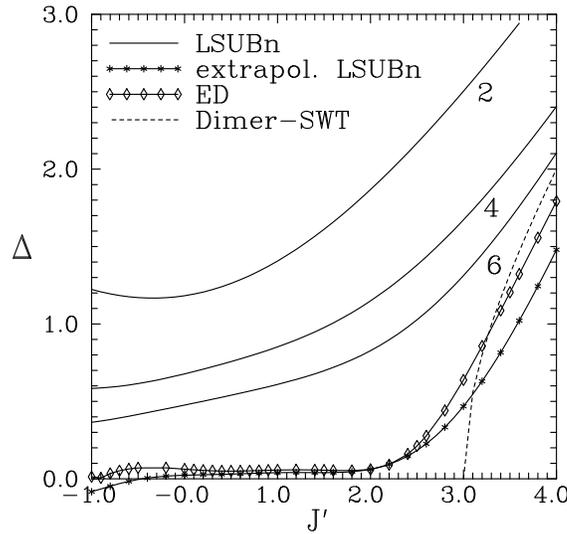


Abbildung 5.3: Energielücke  $\Delta$  zwischen der Energie der niedrigsten Anregung und der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von  $J'$ . Es werden die Ergebnisse der LSUB $n$ -Näherungen mit Extrapolation, das Resultat der exakten Diagonalisierung (nach Gl. (4.71) extrapoliert) und das der dimerisierten SWT angegeben.

für beliebig große Werte von  $J'$  ein Gap mit dem Wert Null liefern, und ein Phasenübergang zur dimerisierten Phase nicht zu erkennen ist. Auch dies spricht für die Schwäche der SWT in der dimerisierten Phase.

### 5.1.2 Energie und Magnetisierung im Grundzustand

Nachdem die Resultate hinsichtlich der Beschreibung des Phasenüberganges zur dimerisierten Phase analysiert wurden, sollen die Ergebnisse für die Energie und die Untergitter-Magnetisierung im Grundzustand jetzt darüber hinaus für den Bereich  $J' > 0$  weiter betrachtet werden.

#### Grundzustandsenergie

Beim Vergleich der Resultate für die Grundzustandsenergie findet man für  $J' > 0$  eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der CCM und denen der exakten Diagonalisierung (s. Abb. 5.4 und Tab. 5.2). Die Abweichung zwischen den extrapolierten CCM-Ergebnissen (LSUB2-8 in Tab. 5.2) und den extrapolierten ED-Ergebnissen ist überall deutlich kleiner als 1% und in der stark dimerisierten Phase (z.B. bei  $J' = 100$ ) praktisch nicht mehr vorhanden.

Erwartungsgemäß ist für große  $J'$  die Dimer-Spinwellentheorie besonders gut, da sie von dem vollständig dimerisierten Valence-Bond-Zustand ausgeht. So liefert diese Methode bereits bei  $J' = 3$  einen Wert, der weniger als 3% von den CCM-, bzw. ED-Resultaten entfernt ist (und damit deutlich besser ist, als das Ergebnis der renormierten SWT in 2.Ordnung, die vom Néelzustand ausgeht), für  $J \gtrsim 5$  gibt es kaum noch Abweichungen.

Tabelle 5.2: Grundzustandsenergie pro Platz  $E/N$  des  $J$ - $J'$ -Modells bei verschiedenen Werten von  $J'$ ; Vergleich der Resultate der einzelnen Methoden (in unterschiedlichen Naherungsordnungen).

Methode	$J' = 1$	$J' = 2$	$J' = 3$	$J' = 5$	$J' = 10$	$J' = 100$
LSWT 1Bos <sup>1)</sup>	-0.6579	-0.8298	-1.0117*	-1.3922*	-2.389*	-21.48*
LSWT	-0.6579	-0.8442	-1.0605*	-1.5445*	-2.906*	-32.67*
SWT 1.Ord	-0.6704	-0.8665	-1.1078	-1.6785*	-3.385*	-44.37
RSWT 0.Ord	-0.6704	-0.8669	-1.1114	-1.7021*	–	–
RSWT 2.Ord	-0.6700	-0.8687	-1.1208	-1.7475*	–	–
LSUB2	-0.6483	-0.8472	-1.1066*	-1.7292*	-3.491*	-37.14
SUB2	-0.6508	-0.8502	-1.1100	-1.7329*	-3.494*	-37.14
LSUB4	-0.6637	-0.8712	-1.1542	-1.8450	-3.714	-37.49
LSUB6	-0.6670	-0.8766	-1.1687	-1.8817	-3.754	-37.5013
LSUB8	-0.6682	-0.8786	-1.1754	-1.8965	-3.763	-37.5014
LSUB2-8	-0.6697	-0.8812	-1.1829	-1.9153	-3.781	-37.49
LSUB4-8	-0.6697	-0.8811	-1.1855	-1.9172	-3.769	-37.4998
Variationsrechn.	-0.5417	-0.7917	-1.1250	-1.8750	-3.750	-37.50
Dimer-SWT	–	–	-1.2168	-1.9179	-3.770	-37.5019
ED	-0.6686	-0.8780	-1.1803	-1.9011	-3.762	-37.5011

1) Ein-Bosonen-Darstellung, alle anderen Spinwellennaherungen in Zwei-Bosonen-Darstellung.

\* Der Wert liegt um mindestens 5% uber dem Resultat der Variationsrechnung, welches eine obere Grenze der Energie darstellt. Er ist also deutlich zu gro.

Fur  $0 \lesssim J' \lesssim 2.5$  findet man auch fur die Ergebnisse der Spinwellenrechnung eine sehr gute Ubereinstimmung mit den CCM- und ED-Resultaten. Die Genauigkeit der SWT wird dabei in hoheren Ordnungen besser. Es ist zu beachten, da die 2. Korrektur  $\Delta E^{(2)}$  zur renormierten SWT fur  $J' < -0.8$  und fur  $J' > 1.4$  negativ wird.<sup>8</sup> Im ganzen Parameterbereich uberschreitet  $\Delta E^{(2)}$  nicht den Anteil von 3.5% des Resultats der Energie in der RSWT nullter Ordnung.

Fur  $J' \gtrsim 3.0$  zeigen die SWT-Resultate dagegen eine signifikante Abweichung zu den Ergebnissen der CCM und ED. Diese Spinwellen-Resultate sind fur groere  $J'$  offensichtlich schlechter, da sie uber den entsprechenden Ergebnissen der Variationsrechnung (s. Gl. (4.67)), die eine obere Grenze fur die Grundzustandsenergie liefern, liegen. Wie Tab. 5.2 zeigt, sind z.B. fur  $J' = 5$  alle SWT-Resultate deutlich uber dem Ergebnis der Variationsrechnung. Die CCM-Ergebnisse liegen im Gegensatz dazu ab LSUB6 stets unterhalb dieser oberen Grenze und fur LSUB4 nur geringfugig daruber. Das Versagen der SWT beginnt ungefur mit  $J' = J'_s$ , also mit dem Phasenubergang

<sup>8</sup>Eine negative Korrektur 2. Ordnung  $\Delta E^{(2)}$  (s. auch Gl. (4.45)) ist nur fur nichthermitische Operatoren, wie die Dyson-Maleev-Wechselwirkung  $V_{DM}$  (und damit auch  $V_{DM}^{(4)}$ ) moglich, da der Zahler von Gl. (4.45) dafur negativ werden mu (wegen  $\mathcal{E}_n < 0$ ), was fur hermitische Operatoren nicht moglich ist.

zur dimerisierten Phase. Da sowohl die CCM, als auch die SWT den geordneten Néelzustand als Ausgangspunkt (Modellzustand) haben, kann man feststellen, daß die CCM viel besser als die SWT in der Lage ist, den Übergang zu dem rotationsinvarianten ungeordneten Zustand, bzw. auch zu dem komplett dimerisierten Zustand (dargestellt durch die Variations-Wellenfunktion in Gl. (4.66) mit  $t = 1$ ) zu beschreiben. Bemerkenswert ist dabei, daß sogar die einfachste CCM-Näherung (LSUB2) das richtige asymptotische Ergebnis für die Energie (d.h. Gl. (4.67)) für sehr große Werte von  $J'$  liefert (s. auch den Fall  $J' = 100$  in Tab. 5.2). Die SWT liefert dagegen in diesem Bereich in allen verfügbaren Ordnungen<sup>9</sup> ein qualitativ falsches Resultat.

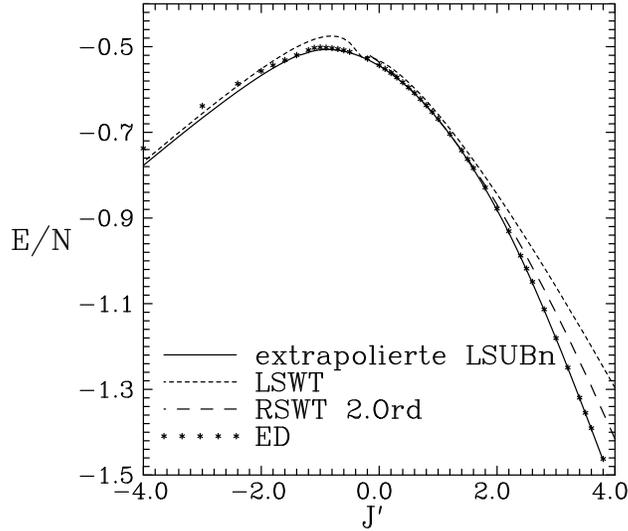


Abbildung 5.4: Grundzustandsenergie des  $J$ - $J'$ -Modells in Abhängigkeit von  $J'$  mit den extrapolierten CCM-LSUB $n$ -Näherungen im Vergleich zu den Resultaten der linearen SWT, der renormierten SWT in zweiter Ordnung (letztere nur für die Néelphase) und dem Ergebnis der exakten Diagonalisierung (nach Gl. (4.69) extrapoliert).

### Untergitter-Magnetisierung

Die extrapolierten Resultate der CCM (LSUB2-8) für die Untergitter-Magnetisierung  $m$  sind in der langreichweitig geordneten Phase (bei  $J' < J'_s$ ) deutlich größer als die entsprechenden ED-Resultate (s. Abb. 5.1 und Tab. 5.1). Wie bereits bei der Abschätzung von  $J'_s$  erörtert wurde, ist das in dem ED-Extrapolationsansatz (mit  $m \propto N^{-1/2}$ ) begründet.

Dagegen gibt es für  $J' \lesssim 2$  zwischen diesem CCM-Resultat und den Resultaten der Spinwellentheorie eine recht gute Übereinstimmung (s. auch Abb. 5.2b). Die Ergebnisse der verschiedenen Ordnungen der SWT weichen hier nur geringfügig voneinander ab, wobei das Resultat der höchsten Ordnung (RSWT 2. Ordnung) i.allg. dem CCM-

<sup>9</sup>Die renormierte SWT läßt sich für  $J' \gtrsim 6.5$  nicht durchführen, da die Gleichung (4.39) für den Renormierungsfaktor  $Z$  dann keine Lösung mehr hat. Dabei ist zu bemerken, daß die RSWT bereits schon für etwas kleinere Werte von  $J'$  mit  $m < 0$  unphysikalische Lösungen liefert. Die Tatsache, daß sich die Renormierung schließlich nicht mehr durchführen läßt, ist somit physikalisch ohne Relevanz.

Resultat am nächsten kommt. Im Fall des einfachen quadratischen Gitters ( $J' = 1$ ) bewirkt die SWT in erster Ordnung keine Veränderung des Resultates gegenüber der LSWT, und die renormierte SWT in zweiter Ordnung nur eine sehr geringe.<sup>10</sup>

Bei  $J' \gtrsim 2$  sind die Abweichungen zwischen der CCM und der SWT sehr groß, und die SWT wird sehr schlecht. Die Abb. 5.2b zeigt außerdem sehr deutlich, daß die Abweichungen zwischen den einzelnen SWT-Resultaten mit wachsendem  $J' > 1$  größer werden. Auch das ist ein Hinweis darauf, daß die allgemein bekannte Genauigkeit der SWT (und auch bereits der linearen SWT) bei  $J' = 1$ , welche in ihrem Ausmaß<sup>11</sup> nicht richtig verstanden wird, mit kleinerer langreichweitiger Ordnung geringer wird. Das ist verständlich, da die SWT von einem geordneten Zustand ausgeht, und somit um so schlechter wird, je schwächer die Ordnung ist. Dies wird nicht nur in der dime-risierten Phase (wo die SWT total versagt) oder in der Nähe dieser Phase deutlich, sondern (in geringerem Ausmaß) auch in der frustrierten Phase ( $J' < 0$ , s. weiter unten). Im Gegensatz dazu ist die CCM, die von dem gleichen geordneten Zustand wie die SWT ausgeht, sehr gut in der Lage, einen Quantenzustand mit viel schwächerer Ordnung zu beschreiben.

#### **Bemerkung zum Fall $J' = 1$**

Im Falle des einfachen quadratischen Gitters ( $J' = 1$ ) werden die Resultate der Spinwellentheorie [76, 81, 83] und die der CCM [45, 62] reproduziert. Sie sind (besonders in den höheren Näherungsordnungen) in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Methoden (z.B. mit denen der Reihenentwicklung [93]  $E/N = -0.6693$  und  $m = 0.307$ ).

#### **Bemerkung zum statistischen Fehler der CCM-Extrapolation**

Die Abweichungen zwischen den beiden extrapolierten LSUB $n$ -Ergebnissen LSUB2-8 und LSUB4-8 (s. Tab. 5.1 und Tab. 5.2) können als ein Maß für die Genauigkeit der CCM-Extrapolationsansätze für die Energie und die Magnetisierung (s. Abschnitt 3.4) angesehen werden. Es zeigt sich dabei, daß diese Genauigkeit bei  $J' = 1$  am größten ist, für größeres  $J'$  geringer wird und für sehr großes  $J'$  (z.B.  $J' = 100$ , s. Tab. 5.2) wieder größer wird. Diese Aussage läßt sich durch die Betrachtung des mittleren quadratischen Fehlers der Extrapolation (für LSUB2-8) bestätigen. Dieser Fehler ist z.B. bei der Magnetisierung für  $J' > 0$  generell kleiner als  $10^{-5}$ , hat ungefähr bei  $J' = J'_s$  (also am Phasenübergang) ein Maximum und genau bei  $J' = 1$  ein Minimum ( $\approx 10^{-7}$ ). Bei  $J' \gg J'_s$  ist der Fehler wieder in der gleichen Größenordnung wie bei  $J' = 1$ .

Insgesamt sind die Extrapolationsansätze für die LSUB $n$ -Resultate also im gesamten Bereich  $J' > 0$  geeignet. Dagegen ist bei  $J' \lesssim -1.5$ , wo die CCM bei Verwendung des Néel-Modellzustandes zu versagen anfängt, der Fehler (mit diesem Modellzustand)

---

<sup>10</sup>In der Ein- und Zwei-Bosonen-Darstellung bzw. in der SWT 1. Ordnung und der RSWT in 0. Ordnung sind die Resultate für  $m$  bei  $J' = 1$  sowieso jeweils identisch.

<sup>11</sup>Das Ergebnis der LSWT bei  $J' = 1$  für  $m$  ist ausgesprochen gut, und sicherlich besser als das entsprechende mit der CCM-LSUB8. Das ist etwas überraschend, da bei der LSUB8 in einer sehr systematischen Weise die verschiedenen Korrelationen berücksichtigt werden. Dagegen ist die SWT eine Reihenentwicklung mit einem kleinen Parameter proportional zu  $1/s$ , die im Falle der LSWT nach dem zweiten Term ( $O(1/s^0)$ ) abgebrochen wird, wobei jedoch der nächste Term ( $O(1/s)$ ) bei  $J' = 1$  keinen Beitrag liefert.

deutlicher größer als im Bereich  $J' > 0$ .

## 5.2 $J' = 0$ – Honigwaben-Gitter

Der Spezialfall des  $J$ - $J'$ -Modells mit  $J' = 0$  ist äquivalent zum antiferromagnetischen Honigwaben-Gitter (mit der Austauschwechselwirkung  $J = 1$ ). Die wichtigsten Resultate dieses Falls sind in Tab. 5.3 angegeben.

Tabelle 5.3: Grundzustandsenergie pro Platz, Untergitter-Magnetisierung und Anregungs-Gap des  $J$ - $J'$ -Modells bei  $J' = 0$ . Dieser Spezialfall entspricht dem antiferromagnetischen Honigwaben-Gitter.

	RSWT 2.O	LSUB2	LSUB4	LSUB6	LSUB8	LSUB2-8	ED
$E/N$	-0.5358	-0.5254	-0.5397	-0.5425	-0.5435	-0.5447	-0.5429
$m$	0.2779	0.3989	0.3542	0.3336	0.3212	0.2815	0.2277
gap	–	1.182	0.678	0.476	–	0.02	0.06

Die extrapolierten CCM-LSUB $n$ -Ergebnisse (mit LSUB2-8 bezeichnet) zeigen sich in guter Übereinstimmung mit den entsprechenden Resultaten der exakten Diagonalisierung (ED) und denen der Spinwellentheorie. Die mit der ED berechnete Magnetisierung  $m$  ist allerdings (wie auch bei  $J' > 0$ , s. Abb. 5.1) kleiner als das CCM-Ergebnis. Dagegen stimmt das CCM-Resultat der Magnetisierung gut mit dem Resultat der renormierten SWT in zweiter Ordnung überein. Eine gute Übereinstimmung gibt es auch mit dem Resultat der Reihenentwicklung [94] ( $m = 0.26$ ), nicht so gut ist sie dagegen bei dem Ergebnis von Monte-Carlo-Rechnungen [95] ( $m = 0.22$ ) und bei dem Ergebnis einer Standard-SWT in 1. Ordnung [68] ( $m = 0.24$ ).<sup>12</sup> Es bleibt zu erwähnen, daß die Ergebnisse der CCM, die hier erzielt wurden, mit früheren CCM-Rechnungen in geringerer Ordnung [44] übereinstimmen.

Die verschiedenen Ordnungen der SWT zeigen leichte Abweichungen voneinander, aber auch die LSWT (mit ihr folgt z.B.  $m = 0.243$ ) beschreibt noch gut den Grundzustand. Das langreichweitig geordnete unfrustrierte Honigwaben-Gitter kann man also ähnlich gut wie das einfache quadratische Gitter mit der SWT behandeln, die CCM ist natürlich auch gut geeignet.

## 5.3 $J' < 0$ – Frustration

Bei  $J' < 0$  ist das  $J$ - $J'$ -Modell frustriert, da eine der vier nächsten-Nachbar-Bindungen ferromagnetisch ist.

<sup>12</sup>Dieses SWT-Resultat stimmt nicht mit dem entsprechenden in dieser Arbeit überein, was auch nicht der Fall sein muß, da in [68] ein anderer Gitterstrukturfaktor (der des Honigwaben-Gitters) verwendet wurde. Aus diesem Grund sind die Spinwellenreihen nicht direkt vergleichbar.

### 5.3.1 Grundzustandsenergie

Für  $J' \lesssim -2$  liegen die extrapolierten ED-Resultate für die Energie etwas über den Resultaten der CCM (s. Abb. 5.4), ein Verhalten, das in den anderen Bereichen des Parameters  $J'$  nicht auftritt. Dieses Verhalten kann man damit begründen, daß sich hier die Werte für die Energie der kleinen Gitter (die bei der exakten Diagonalisierung betrachtet werden) nicht so gut mit dem Skalierungsgesetz für die Energie (s. Gl. (4.69)) extrapolieren lassen, wie in den anderen Bereichen von  $J'$ . Die „finite size“-Effekte, also die Effekte, die durch die Randbedingungen der endlichen Gitter verursacht werden, sind nämlich für ein System mit einer inkommensurablen helixartigen Struktur größer, als für Systeme mit (beispielsweise) Néelordnung oder mit dimerisierten Spinpaaren. Somit sind die ED-Resultate hier also nicht so verlässlich, wie für die anderen Parameterbereiche des  $J$ - $J'$ -Modells. Es zeigt sich jedoch, daß das beste einzelne ED-Ergebnis (durch Diagonalisierung eines Gitters mit 32 Spins) nur eine geringe Abweichungen vom CCM-Resultat hat, und zwar sowohl im frustrierten, als auch im unfrustrierten Bereich.

Beim Vergleich der Ergebnisse für die Grundzustandsenergie zeigt sich für  $J' \lesssim -2$  eine gute Übereinstimmung zwischen den CCM-Ergebnissen und dem Resultat der linearen SWT (s. Abb. 5.4). In diesem Bereich sind die Quantenfluktuationen relativ gering (s. weiter unten), und die SWT, die von dem helixartig geordneten klassischen Grundzustand ausgeht, ist somit gut geeignet, das System zu beschreiben. Dagegen gibt es für die Energie größere Abweichungen in der Nähe des Phasenübergangspunktes zwischen der Néel-artigen und der helixartigen Phase. Auch das ist verständlich, da hier die stärkeren Quantenfluktuationen die klassische Ordnung fast vollständig zerstören, und die SWT (ähnlich wie in der dimerisierten Phase) bei schwächerer magnetischer Ordnung schlechter wird.<sup>13</sup> Die Ergebnisse sind jedoch nicht so schlecht wie in der dimerisierten Phase.

### 5.3.2 Phasenübergang zur helixartigen Phase

Im klassischen Fall bewirken die frustrierenden  $J'$ -Bindungen, daß die Néel-Ordnung (mit dem charakteristischen Winkel  $\Phi = 0$ ) mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung in eine helixartige Ordnung (mit  $\Phi \neq 0$ ) übergeht. Dieser Übergang erfolgt bei einem bestimmten kritischen Wert von  $J'$ , der hier mit  $J'_c$  bezeichnet wird. Für den klassischen Fall gilt  $J'_c = -1/3$  (s. Abschnitt 2.2).

Anzeichen für den entsprechenden Phasenübergangspunkt im quantenmechanischen Fall lassen sich auf zwei Arten gewinnen. Mit der CCM wird (für die einzelnen LSUB $n$ -Näherungen) das kritische  $J'_c$  auf direkte Weise dadurch bestimmt, daß für den quantenmechanisch optimierten Winkel  $\Phi_{\text{LSUB}n}$  (s. Gl. (3.49))  $\Phi_{\text{LSUB}n}(J') \neq 0$  gerade bei  $J' < J'_c$  gilt (s. auch weiter unten). Das bedeutet also, daß die Néelordnung für

---

<sup>13</sup>Ein weiterer Grund könnte sein, daß der Spinwellenrechnung hier der klassische Grundzustand des Modells (mit  $\Phi = \Phi_{\text{kl}}$ ) zugrundegelegt wird, während bei der CCM der quantenmechanisch optimierte Winkel (also  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB}n}$  für LSUB $n$ ) verwendet wird. Dadurch wird die CCM-Energie natürlich geringer, als wenn  $\Phi = \Phi_{\text{kl}}$  verwendet werden würde.

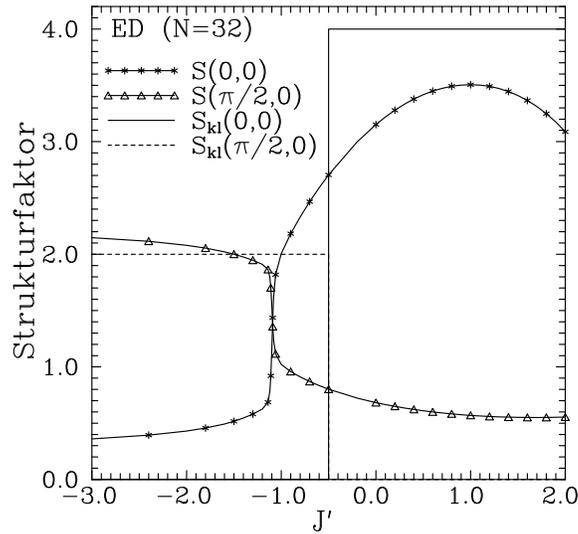


Abbildung 5.5: Strukturfaktor  $S(\mathbf{k}) = \frac{2}{N} \sum_{i,j \in A} e^{i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{k}} \langle \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \rangle$  im Grundzustand für den Hamiltonoperator des  $J$ - $J'$ -Modells (Gl. 2.1) mit 32 Spins für den quantenmechanischen und den klassischen Fall. Die Néelordnung ( $\mathbf{k} = (0, 0)$ ) wird im klassischen Modell für  $J' < -0.5$  instabil gegenüber der helixartigen Ordnung, im quantenmechanischen Fall verschwindet sie aber erst bei  $J' \lesssim -1.1$ . Die Néelordnung ist also in einem bestimmten Gebiet quantenmechanisch stabil, wo sie klassisch bereits instabil ist.

$J' < J'_c$  energetisch instabil gegenüber der helixartigen Ordnung wird. Es heißt jedoch nicht notwendigerweise, daß die Néelordnung bereits endgültig zerstört ist,<sup>14</sup> denn das ist erst der Fall, wenn der magnetische Ordnungsparameter  $m$  des *Néelzustandes* (also die Untergitter-Magnetisierung) Null wird. Der Wert von  $J'$ , an dem  $m$  Null wird, ist also i.allg. etwas kleiner als  $J'_c$ , kann aber selbst auch als grobe Abschätzung für  $J'_c$  verwendet werden, wovon bei der ED und der SWT Gebrauch gemacht wird. Mit der CCM erkennt man beispielsweise direkt, daß für eine gegebene  $\text{LSUB}_n$ -Näherung die Untergitter-Magnetisierung erst bei einem Wert von  $J'$  Null wird, der etwas kleiner als der mittels  $\Phi_{\text{LSUB}_n}$  bestimmte Wert von  $J'_c$  ist.

Tabelle 5.4: Phasenübergangspunkt  $J'_c$  für den Übergang zur helixartigen Phase; Vergleich der Ergebnisse der verschiedenen Methoden.

	LSWT	RSWT 0.Or	RSWT 2.Or	LSUB2	LSUB4	LSUB6	ED
$J'_c$	-0.33*	-2.91*	-1.2*	-0.97	-1.33	-1.35	-0.8*

\* nur grobe Abschätzung, mit dem Kriterium Untergitter-Magnetisierung  $m(J' = J'_c) = 0$

Die Ergebnisse für das kritische  $J'_c$  mit den einzelnen Methoden werden in Tab. 5.4 angegeben. Die lineare SWT liefert  $J'_c \approx -1/3$  (s. auch Abb. 5.2a), also den klassi-

<sup>14</sup>Das wäre nur der Fall, wenn es zwischen beiden geordneten Phasen eine Spinflüssigkeitsphase gäbe, was weiter unten untersucht wird.

schen Übergangspunkt. Das Verhalten der SWT ist für die höheren Ordnungen nicht einheitlich, mit der renormierten SWT in zweiter Ordnung erhält man schließlich  $J'_c \approx -1.2$  (s. auch Abb. 5.2b).

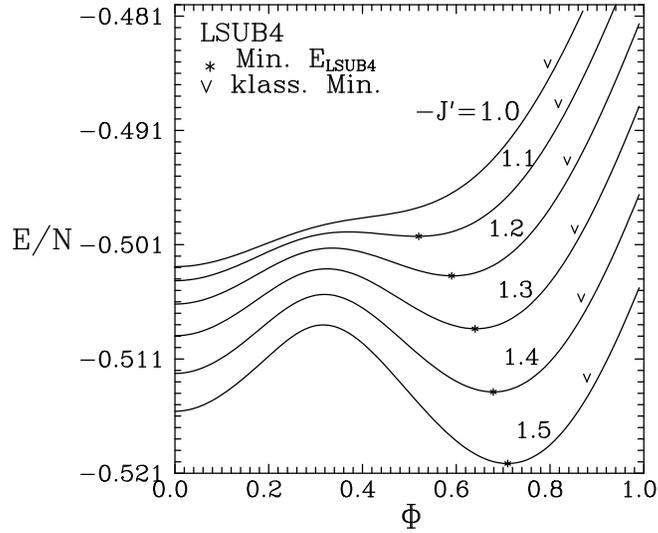


Abbildung 5.6: Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators (2.1) des  $J$ - $J'$ -Modells unter Verwendung einer CCM-LSUB4-Näherung in Abhängigkeit von dem Parameter  $\Phi$  des verwendeten helixartigen CCM-Modellzustandes. Die Abhängigkeit ist für einige Werte von  $J'$  im Bereich  $-1.5 \leq J' \leq -1.1$  angegeben. Bei  $J' \lesssim -1.1$  tritt ein lokales Minimum von  $E(\Phi)$  bei  $\Phi \neq 0$  auf, welches für  $J' \lesssim -1.35$  schließlich ein globales Minimum (d.h. bei  $\Phi = \Phi_{\text{LSUB4}}(J')$ ) wird. Damit wird das typische Szenario eines Phasenüberganges erster Ordnung dargestellt. Die Pfeile (v) kennzeichnen den Wert von  $\Phi_{\text{kl}}$  für die verschiedenen Werte von  $J'$ .

Mit der CCM findet man Anzeichen für eine Verschiebung des kritischen Punktes zu einem Wert  $J'_c \approx -1.35$  (bei LSUB6, s. Abb. 5.7). Die Resultate für den Strukturfaktor, der für ein Gitter mit 32 Spins mittels exakter Diagonalisierung berechnet wurde (s. Abb. 5.5), zeigen ebenfalls eine Verschiebung des Überganges zu stärkeren ferromagnetischen  $J'$ -Bindungen. Beides korrespondiert mit der allgemeinen Vorstellung, nach der Quantenfluktuationen eine collineare Ordnung (wie die Néelordnung) bevorzugen. Deshalb kann der geordnete Zustand im quantenmechanischen Fall in einem Gebiet weiterbestehen, wo er klassisch bereits instabil ist. In den CCM-Betrachtungen erhält man mit dem Néel-Modellzustand ( $\Phi = 0$ ) die minimale Grundzustandsenergie für alle Werte  $J' > J'_c$ , wobei  $J'_c$  auch von der Ordnung  $n$  der entsprechenden LSUB $n$ -Näherung abhängt. Für  $J' < J'_c$  liegt dann ein anderes Minimum der Energie, nämlich eines mit  $\Phi \neq 0$ , tiefer als das Minimum bei  $\Phi = 0$  (s. Abb. 5.6). Von dem Zustand mit  $\Phi \neq 0$  wird angenommen, daß er das quantenmechanische Analogon des klassischen Grundzustandes in zwei Dimensionen ist. Es zeigt sich weiter, daß in der CCM der beschriebene Übergang von einem Minimum zum anderen nicht stetig, sondern sprunghaft erfolgt (s. Abb. 5.6 und Abb. 5.7). Dieses Verhalten ist somit nicht nur ein Anzeichen für einen Phasenübergang, sondern

auch ein Anzeichen für einen Phasenübergang *erster* Ordnung. Damit verändert sich also die Natur des Phasenüberganges aufgrund der Quantenfluktuationen. Dem Phasenübergang zweiter Ordnung im klassischen Fall steht ein Phasenübergang erster Ordnung im Quantenfall gegenüber.<sup>15</sup>

Eine quantenmechanische Optimierung des Modellzustandes, deren Resultate im Falle der CCM eben beschrieben wurden, ist mit der linearen SWT nicht möglich. Bereits minimale Abweichungen des Ausgangszustandes der SWT vom klassischen Grundzustand (also kleine Abweichungen des charakteristischen Winkels  $\Phi$  vom Wert  $\Phi_{\text{kl}}$ ) führen dazu, daß die CCM-Gleichungen des entsprechenden bosonischen Hamiltonoperators keine Lösungen mehr haben. Die lineare SWT liefert damit also kein direktes Anzeichen für eine Verschiebung des Phasenübergangspunktes aufgrund von Quantenfluktuationen. Auch dies ist Ausdruck dafür, daß sich im Rahmen der SWT die magnetische Ordnung des Ausgangszustandes der Theorie nicht sehr stark von der Ordnung des mit dieser Theorie bestimmten Spinwellenzustandes unterscheiden kann.

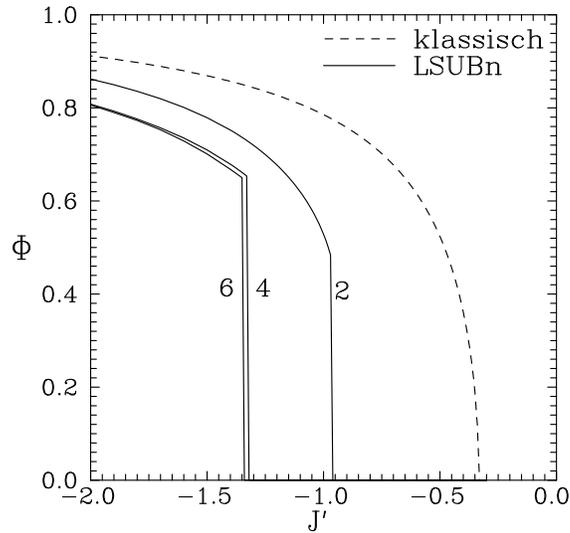


Abbildung 5.7: Der Winkel  $\Phi_{\text{LSUB}n}$  (welcher die Energie  $E(\Phi)$  minimiert, s. Gl. (3.49)) in Abhängigkeit von  $J'$  im Vergleich zum korrespondierenden klassischen Resultat  $\Phi_{\text{kl}}$  (nach Gl. (2.7)). Im Quantenfall (LSUB $n$ ) wird ein Phasenübergang erster Ordnung gefunden (z.B. für LSUB6 bei  $J' \approx -1.35$ , wo  $\Phi_{\text{LSUB}n}$  diskontinuierlich von Null zu ungefähr 0.65 springt). Im klassischen Fall gibt es dagegen einen Phasenübergang zweiter Ordnung bei  $J' = -1/3$ .

### 5.3.3 Magnetischer Ordnungsparameter

Bei der Betrachtung des Ordnungsparameters stellt sich vor allem die Frage, ob zwischen dem langreichweitig geordneten Néel-Zustand, und dem ebenfalls langreichweitig geordneten helixartigen Zustand (also in einem Gebiet um das kritische  $J'_c$ )

<sup>15</sup>Anzeichen für eine solche Situation gibt es auch im eindimensionalen Ferrimagneten [19].

eine ungeordnete Spinflüssigkeitsphase auftritt. Eine solche Situation gibt es im  $J_1$ - $J_2$ -Modell mit frustrierenden Diagonalbindungen. LSWT- und ED-Resultate [85, 92] sagen für dieses Modell eine Spinflüssigkeitsphase um  $J_2/J_1 \approx 0.5$  voraus. Auch das  $J$ - $J'$ -Modell ist für  $J' < 0$  frustriert, und es stellt sich die Frage, ob Frustration und Quantenfluktuationen auch hier eine solche ungeordnete Phase bilden können.

Die Ergebnisse der LSWT lassen das Auftreten einer solchen Phase vermuten, da der magnetische Ordnungsparameter  $m$  für einen kleinen Bereich um  $J'_c = -1/3$  (konkret bei  $-0.337 \lesssim J' \lesssim -0.332$ ) vollständig verschwindet (s. Abb. 5.2a). Da jedoch die SWT in höheren Ordnungen (ebenso die CCM) deutlich andere Werte für das kritische  $J'_c$  voraussagen (s. Tab. 5.4), kann man auch das Ergebnis der LSWT über eine Spinflüssigkeitsphase nicht als sehr sicher ansehen. Da die SWT um den helixartigen Zustand (mit  $\Phi \neq 0$ ) nicht für höhere Ordnungen durchgeführt wurde, lassen sich mit dieser Methode auch keine weiteren Aussagen über das Vorhandensein einer ungeordneten Phase treffen.

Auch mit der CCM ist das Verhalten des Ordnungsparameters (s. Abb. 5.1) im Gebiet um  $J'_c \approx -1.35$ , wo mit dieser Methode der Quantenphasenübergang erwartet wird, schwierig zu bestimmen. Man kann die LSUB $n$ -Resultate nicht direkt extrapolieren, weil der Punkt des Phasenüberganges sich mit der Ordnung  $n$  der LSUB $n$ -Näherung verschiebt (s. Abb. 5.7). Man findet deshalb auch einen größeren statistischen Fehler der extrapolierten Resultate im Gebiet  $-1.4 \lesssim J' \lesssim -1.0$ . Deshalb werden in diesem Gebiet die Minima (der einzelnen LSUB $n$ -Näherungen) für  $m$  extrapoliert, um eine Abschätzung des Ordnungsparameters zu bekommen. Das so erhaltene Minimum ( $m \approx 0.05$ ) liegt bei  $J' \approx -1.2$ . Die extrapolierten Resultate der ED stimmen damit nicht besonders gut überein, da bei ihnen der Ordnungsparameter bei  $J' \approx -0.8$  Null wird. Allerdings sind diese Resultate gerade in diesem Gebiet auch nicht besonders gut, denn aufgrund des großen Einflusses der Randbedingungen der endlichen Gitter kommt es zu einem großen statistischen Fehler.

Als ein Ergebnis all dieser Schwierigkeiten ist es nicht möglich zu entscheiden, ob die Quantenfluktuationen und die Frustration in der Lage sind, eine ungeordnete Quantenspinflüssigkeitsphase (d.h. mit  $m = 0$  in einer endlichen Region) zwischen dem Néelzustand und dem helixartigen Zustand zu bilden. Allerdings lassen die CCM-Resultate vermuten, daß es entweder keine Quantenspinflüssigkeitsphase gibt, oder daß eine solche (wenn überhaupt) nur in einer sehr kleinen Region existiert.

Beim Vergleich der Resultate des Ordnungsparameters zeigt sich für  $J' \lesssim -2$  eine recht gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der LSWT und denen der extrapolierten LSUB $n$  (z.B. bei  $J' = -3$ :  $m = 0.346$  mit der LSWT,  $m = 0.333$  mit der CCM). Auch in Bezug auf den Ordnungsparameter ist die SWT also für  $J' \lesssim -2$  gut geeignet, das System zu beschreiben. Bei schwächeren ferromagnetischen Bindungen (insbesondere bei  $J' \approx J'_c$ ) beschreibt sie die magnetische Ordnung allerdings sehr schlecht.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Unter Anwendung verschiedener Methoden wurde der Einfluß von Quantenfluktuationen auf das Phasendiagramm des Grundzustandes eines Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagneten auf dem quadratischen Gitter mit zwei Arten von nächsten-Nachbar-Bindungen untersucht. Das Modell dient zur Beschreibung zweier wichtiger Mechanismen zur Zerstörung Néel-artiger Ordnung – der Frustration und der lokalen Singulett-Bildung. Verwendet wurden vor allem die Coupled-Cluster-Methode, eine universelle Vielteilchenmethode und die Spinwellentheorie. Beide Methoden (und besonders die CCM) wurden in hohen Ordnungen angewendet. Zum Vergleich wurden Ergebnisse der exakten Diagonalisierung herangezogen. Mittels der CCM und der ED wurde zusätzlich das Spingap berechnet.

Es zeigte sich, daß das Phasendiagramm des Modells eine helixartige Phase, eine Néel-artig geordnete und eine quantenmechanisch ungeordnete (dimerisierte) Phase mit einem endlichen Spingap enthält. Dabei gibt es offensichtlich einen Phasenübergang zweiter Ordnung von der Néelphase zur dimerisierten Phase mit einem Spingap; im klassischen Fall gibt es an dieser Stelle keinen Phasenübergang.

Mit der CCM wurden außerdem Anzeichen für einen quantenmechanisch-induzierten Phasenübergang erster Ordnung zwischen der Néelphase und der helixartigen Phase gefunden. Dieser Phasenübergang ist im klassischen Fall von zweiter Ordnung. Es wurden weitere Anzeichen gefunden, daß sich der Phasenübergangspunkt durch Quantenfluktuationen verschiebt, so daß der collineare Néel-artige Zustand noch in einem Gebiet weiterbesteht, wo er klassisch bereits instabil ist und durch den helixartigen nichtcollinearen Zustand ersetzt wird.

Die Frage, ob Quantenfluktuationen und Frustration in der Lage sind, zwischen der Néel-artigen und der helixartigen Phase eine ungeordnete Quantenspinflüssigkeitsphase zu bilden, konnte nicht zweifelsfrei entschieden werden. Die Berechnungen mit der CCM deuten jedoch darauf hin, daß es keine solche Phase gibt.

Für das Honigwaben-Gitter, das einen Spezialfall des Modells darstellt, wurden genaue CCM- und SWT-Ergebnisse in hohen Näherungsordnungen angegeben.

Die verwendeten Näherungsmethoden wurden einem kritischen Vergleich unterzogen, um Aussagen über ihre Eignung zur Beschreibung der verschiedenen physikalischen Prozesse zu machen.

Die CCM zeigte sich zur Beschreibung aller physikalischen Prozesse im Modell gut geeignet, d.h., sie liefert sowohl für Bereiche mit nichtcollinearer Ordnung, als auch für solche mit Singulett-Formierung gute Resultate. Dabei ist sie in der dimerisierten Phase besonders genau und beschreibt auch das Spingap korrekt. Für diese Methode wurde auch im gesamten Parameterbereich eine gute Übereinstimmung mit den ED-Resultaten gefunden.

Im Gegensatz dazu versagte die SWT in der dimerisierten Phase aufgrund der größeren longitudinalen Spinfluktuationen, die in dieser Phase auftreten. Generell zeigte sich, daß die SWT, die von einem geordneten Zustand ausgeht, in Bereichen mit schwächerer magnetischer Ordnung schlechter ist. Die CCM, die von dem gleichen Zustand ausgeht, ist in diesen Bereichen deutlich besser.

In der frustrierten Phase mit helixartiger nichtcollinearer Ordnung ist auch die SWT recht gut geeignet, wobei sie auch hier mit schwächerer magnetischer Ordnung schlechter wird. Eine quantenmechanische Optimierung des Modellzustandes, wie er für die CCM durchgeführt wurde, ist mit der linearen SWT nicht möglich, diese liefert damit also kein direktes Anzeichen für eine Verschiebung des Phasenübergangspunktes aufgrund von Quantenfluktuationen. Auch dies ist Ausdruck dafür, daß sich im Rahmen der SWT die magnetische Ordnung des Ausgangszustandes der Theorie nicht sehr stark von der Ordnung des mit dieser Theorie bestimmten Spinwellenzustandes unterscheiden kann.

Insgesamt läßt sich schlußfolgern, daß die CCM sehr gut zur Beschreibung der Eigenschaften von Quantenspinsystemen geeignet ist. Sie ist nicht nur mit den etablierten Methoden auf diesem Gebiet vergleichbar, sondern teilweise besser.

# Anhang A

## Zur CCM für Spinsysteme

### A.1 Algorithmus zum Erzeugen der fundamentalen Konfigurationen

Hier wird dargestellt wie die fundamentalen Konfigurationen erzeugt werden können. Die Methode wird am *Beispiel der LSUB<sub>4</sub>-Näherung* für ein quadratisches Gitter mit voller Symmetrie<sup>1</sup> und einem Néelzustand als Modellzustand veranschaulicht.

#### Erzeugen aller verbundenen Konfigurationen

Zunächst werden unter Berücksichtigung aller Gittersymmetrien die verbundenen Formen mit (LSUB $n$ ) bis zu  $n$  Spins erzeugt. Verbunden heißt, daß man von jedem Spin der Konfiguration zu jedem anderen über nächste Nachbarn gelangen kann, ohne freie Felder zu berühren. Solche Objekte heißen auch *lattice animals*. Sie spielen bei Perkulations- und Zellwachstumsproblemen eine Rolle. Es gibt effektive Algorithmen um solcher Formen mit bis zu 20 Plätzen auf regulären Gittern zu zählen, aber das asymptotische Verhalten der Anzahl solcher Formen bei wachsender Größe ist eine offene kombinatorische Frage [50]. Der hier verwendete Algorithmus ist nicht effektiv, und muß es auch nicht sein, da man sowieso nur mit einigen tausend Konfigurationen rechnen kann (Speicherproblem für die CCM-Gleichungen).

Ein wichtiges Hilfsmittel ist ein rechtwinkliges *Begrenzungsdreieck* [45], welches alle möglichen Konfigurationen enthält. Die Abb. A.1 stellt das Begrenzungsdreieck dar, daß zum Erzeugen der Konfigurationen bei LSUB<sub>4</sub> nötig ist. Alle Plätze des Dreiecks werden numeriert, und man kann jeder Konfiguration (verbunden oder unverbunden) auf eineindeutige Weise einen Zahlenwert<sup>2</sup> zuordnen. In Abb. A.1 wird an einem Beispiel dargestellt, wie dieser Zahlenwert berechnet wird.

---

<sup>1</sup>Das entspricht dem  $J$ - $J'$ -Modell (2.1) mit  $J' = 1$ , also ein völlig symmetrisches quadratisches Gitter mit vier Rotationssymmetrien ( $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ ) und vier Spiegelsymmetrien (x,y-Achse und beide Diagonalen), also zusammen acht Punktsymmetrien.

<sup>2</sup>Es könnten im Beispiel (s. Abb. A.1) theoretisch alle ganzen Zahlen von 1 (Konfiguration mit einem Spin auf Platz 0) bis  $2^{11} - 1$  (Konfiguration mit 10 Spins auf den Plätzen 0 bis 9) sein. Hier werden natürlich nur die Konfigurationen mit bis zu vier Spins (LSUB<sub>4</sub>) betrachtet.

9  
 ⑦ 8                    Wert dieser Konfiguration:  $2^1 + 2^6 + 2^7 = 194$   
 4 5 ⑥  
 0 ① 2 3

Abbildung A.1: Beispiel für ein Begrenzungsdreieck auf einem quadratischen Gitter mit der Seitenlänge  $n = 4$ . Es gibt  $n(n + 1)/2$  Gitterplätze die hier von 0 bis 9 numeriert sind. Die Kreise kennzeichnen die Spins einer bestimmten Konfiguration (im Beispiel ist es eine unverbundene Konfiguration mit drei Spins), deren Zahlenwert bestimmt wird.

Vorgehensweise am Beispiel (LSUB4, quadratisches Gitter):

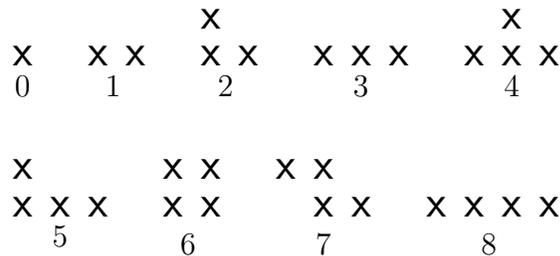
1. Erzeuge sukzessive alle verbundenen Formen mit bis zu 4 Spins auf dem quadratischen Gitter. An diesem Punkt werden noch *keine Symmetrien* benutzt. Dabei geht man rekursiv vor. Wenn man alle Formen mit  $n$  Spins hat, setzt man für jede dieser Formen alle möglichen nächsten Nachbarn hinzu. Auf diese Art erhält man schließlich alle Formen mit  $n + 1$  Spins usw.

2. Für *jede* unter 1. erzeugte Konfiguration mit bis zu 4 Spins führt man für *jede* Punktsymmetrie folgende Schritte durch

- Punktsymmetrie auf Konfiguration anwenden  $\Rightarrow$  transformierte Konfiguration
- transformierte Konfiguration unter Beachtung der Translationssymmetrie ins Begrenzungsdreieck verschieben
- Zahlenwert der transformierten Konfiguration ermitteln

Zu einer Konfiguration erhält man damit also verschiedene transformierte Konfigurationen (für die einzelnen Punktsymmetrien). Die transformierte Konfiguration mit dem kleinsten Zahlenwert wird dann genommen, und wenn sie noch nicht in der Liste der bereits bekannten ist, wird sie zu dieser hinzugesetzt.

$\Rightarrow$  Liste aller verbundenen Konfigurationen des Beispiels:



Die Konfigurationen sind im Beispiel mit fortlaufenden Nummern versehen.

**Erzeugen aller unverbundenen Konfigurationen aus dieser Liste**

Aus jeder verbundenen Konfiguration der Liste werden systematisch Spins entfernt. Dadurch erhält man unverbundene Konfigurationen, auf die dann (wie oben) die Punktsymmetrien angewendet werden, die Verschiebung ins Begrenzungsdreieck erfolgt, und schließlich die transformierte Konfiguration mit dem kleinsten Zahlenwert

ausgewählt, und wenn neu, zur Liste hinzugefügt wird. Wir erhalten im Beispiel (Punkte ( · ) kennzeichnen freie Gitterplätze ohne Spinerzeugungsoperatoren):

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \text{(aus 2): } \cdot \mathbf{x} \\ 9 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \text{(aus 3): } \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \\ 10 \end{array} & \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \text{(aus 4): } \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \\ 11 \end{array} \\
 \\
 \begin{array}{ccc} \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \text{(aus 5): } \cdot \cdot \mathbf{x} & \cdot \mathbf{x} \mathbf{x} & \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} \\ 12 & 13 & 14 \end{array} & \begin{array}{ccc} \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \text{(aus 8): } \mathbf{x} \cdot \cdot \mathbf{x} & \mathbf{x} \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} & \\ 15 & 16 & \end{array}
 \end{array}$$

Damit hat man nun insgesamt 17 fundamentale Konfigurationen.<sup>3</sup>

Als letztes wird die  $s_T^z$ -Erhaltung berücksichtigt. So gehören beispielsweise in der Konfiguration Nr. 4 drei Spins zu einem und ein Spin zu dem anderen Untergitter, und die  $s_T^z$ -Erhaltung, die fordert, daß die Anzahl der Spins in beiden Untergittern gleich ist, wird verletzt. Wie nun leicht einzusehen ist, sind nur die Koeffizienten der Konfigurationen 1,5,6,7,8,12 und 15 von Null verschieden, die andere Koeffizienten verschwinden. Man hat also genau sieben fundamentale Konfigurationen (fünf verbundene und zwei unverbunden) für die CCM in diesem Beispiel zu berücksichtigen.

### Identifizierung einer Konfiguration

Nachdem alle fundamentalen Konfigurationen gefunden und in einer Liste abgespeichert wurden, stellt sich nun die Frage, wie später (bei der Berechnung der Ket-Gleichungen, s. Anhang A.2) eine bestimmte Konfiguration der mit ihr (aufgrund von Gittersymmetrien) identischen fundamentalen Konfiguration zugeordnet werden kann. Dabei wird der gleiche Algorithmus verwendet, der zum Identifizieren der verschiedenen fundamentalen Konfigurationen benutzt wurde. Auf die Konfiguration werden also die Punktsymmetrien angewendet, sie wird dann (Translationssymmetrie) in das Begrenzungsdreieck verschoben, und man erhält einen Zahlenwert. Der kleinste dieser Zahlenwerte (für die einzelnen Punktsymmetrien) wird genommen und in der Liste der fundamentalen Konfigurationen gesucht. Ist er in der Liste enthalten, hat man die zugehörige fundamentale Konfiguration, ist er nicht enthalten, gehört die Konfiguration nicht zu den fundamentalen Konfigurationen der entsprechenden LSUB $n$ -Näherung (und der Koeffizient der Konfiguration ist Null).

### Bemerkungen zum $J$ - $J'$ -Modell

Dieses Modell hat im Unterschied zum eben beschriebenen Fall eine geringere Symmetrie. Das bewirkt eine leichte Modifikation im Algorithmus. So muß man, aufgrund der geringeren Translationssymmetrie (3.22) des  $J$ - $J'$ -Modells, für die LSUB $n$ -Näherung ein Begrenzungsdreieck mit der Seitenlänge  $n + 1$  benutzen.<sup>4</sup> Dies und die geringe-

<sup>3</sup>Für die LSUB4 gibt es natürlich keine *unverbundenen* Konfigurationen mit vier Spins, da diese nicht auf vier aneinander angrenzenden Plätzen liegen können. Solche Konfigurationen treten aber bei höheren LSUB $n$  auf.

<sup>4</sup>So tritt z.B die Konfiguration  $\mathbf{x} \ \mathbf{x} \ \mathbf{x} \ \mathbf{x}$  zweimal in  $x$ -Richtung auf, einmal mit einer  $J'$ -Bindung zwischen dem 1. und 2. Spin (und 3. und 4.), und einmal (um eins verschoben) mit einer  $J'$ -Bindung zwischen dem 2. und 3. Spin. Ein Begrenzungsdreieck der Seitenlänge 4 kann nicht beide Konfigurationen umfassen.

re Punktsymmetrie bewirken, daß die verschiedenen Konfigurationen des einfachen quadratischen Gitters ( $J' = 1$ ) mehrfach auftreten können, nämlich in verschobener und rotierter bzw. gespiegelter Form.

Tabelle A.1: Anzahl der verschiedenen, nicht äquivalenten (durch Verschiebungen, Rotationen und Spiegelungen hervorgegangenen) Versionen der einzelnen Konfigurationen des einfachen quadratischen Gitters ( $J' = 1$ ) für das  $J$ - $J'$ -Modell mit Néelzustand als CCM-Modellzustand (alles für LSUB4).

$\times \times$	$\times$ $\times \times \times$	$\times \times$ $\times \times$	$\times \times$ $\times \times$	$\times \times \times \times$	$\times$ $\cdot \cdot \times$	$\times \cdot \cdot \times$
3	4	1	4	3	4	3

Für den Néel-Modellzustand (Punktsymmetrien nach (3.23)) zeigt die Tab. A.1 in wieviel verschiedenen (symmetrisch nicht äquivalenten) Versionen die sieben Konfigurationen der LSUB4-Näherung des einfachen quadratischen Gitters auftreten. So tritt z.B. die einzige LSUB2-Konfiguration ( $\times \times$ ) in drei verschiedenen Versionen auf, die Vektoren zwischen den beiden benachbarten Spins in ihnen sind dabei  $p = \{(\pm 1, 0), (0, 1)\}$  (die vierte Möglichkeit, also die Konfiguration mit  $p = (0, -1)$  ist auch für das  $J$ - $J'$ -Modell zu der Konfiguration mit  $p = (0, 1)$  äquivalent). Für LSUB4 ergibt das zusammen also 22 Konfigurationen (s. auch Tab. 3.1).

## A.2 Algorithmus zum Erzeugen der Ket-Zustandsgleichungen

**Berechnung von  $\hat{H}|\Phi\rangle = e^{-S}He^S|\Phi\rangle$**

Der ähnlichkeitstransformierte (3.26) Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , welcher auf den Modellzustand  $|\Phi\rangle$  wirkt, ist zu berechnen.

Unter Verwendung des allgemeinen Ausdrucks für den Ket-Korrelationsoperator (3.18)

$$S = \sum_l \sum_{i_1 i_2 \dots i_l} [i_1 i_2 \dots i_l] s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ \dots s_{i_l}^+ = \sum_{i_1} [i_1] s_{i_1}^+ + \sum_{i_1 i_2} [i_1 i_2] s_{i_1}^+ s_{i_2}^+ + \dots \quad (\text{A.1})$$

und der Eigenschaften der Einzelspinoperatoren (Spin 1/2)

$$s^-|\Phi\rangle = 0, \quad s^z|\Phi\rangle = -1/2|\Phi\rangle,$$

$$\text{und } [s^z, s^\pm]_- = \pm s^\pm, \quad [s^-, s^+]_- = -2s^z$$

erhält man für die ähnlichkeitstransformierten Einzelspinoperatoren mit (3.8) [45]

$$\hat{s}_k^+ = s_k^+, \quad \hat{s}_k^z = s_k^z + F_k s_k^+, \quad \hat{s}_k^- = s_k^- - 2F_k s_k^z - (F_k)^2 s_k^+. \quad (\text{A.2})$$

Weiter können die Vertauschungen zwischen den Spinoperatoren und den  $F_k$ -Operatoren (in (3.27) definiert) folgendermaßen geschrieben werden [45]

$$\begin{aligned} [s_k^z, F_m]_- &= G_{km}s_k^+, & [s_k^-, F_m]_- &= -2G_{km}s_k^z \\ [s_k^z, (F_m)^2]_- &= 2F_m G_{km}s_k^+, & [s_k^-, (F_m)^2]_- &= -2(G_{km})^2 s_k^+ - 4F_m G_{km}s_k^z \end{aligned}, \quad (\text{A.3})$$

wobei die  $G_{km}$  durch (3.27) definiert sind. Es ist nun einfach, die einzelnen Wechselwirkungsterme zwischen zwei Spins zu bestimmen und auf  $|\Phi\rangle$  anzuwenden. An einem Beispiel soll das dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \hat{s}_k^z \hat{s}_m^z |\Phi\rangle &= (s_k^z + F_k s_k^+)(s_m^z + F_m s_m^+) |\Phi\rangle \\ &= (s_k^z s_m^z + s_k^z F_m s_m^+ + F_k s_k^+ s_m^z + F_k F_m s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\ &= (s_k^z s_m^z + (G_{km}s_k^+ + F_m s_k^z) s_m^+ + F_k s_k^+ s_m^z + F_k F_m s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \\ &= (1/4 + G_{km}s_k^+ s_m^+ - 1/2 F_m s_m^+ - 1/2 F_k s_k^+ + F_k F_m s_k^+ s_m^+) |\Phi\rangle \end{aligned}$$

Im folgenden werden die Resultate für alle Wechselwirkungsterme aus (3.14) angegeben. Für  $k \neq m$  gilt

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

Mit (3.14) läßt sich damit (3.28) berechnen. Diese Betrachtungen gelten für den allgemeinen Ket-Korrelationsoperator (A.1) und sind *nicht* an bestimmte Näherungen (z.B. LSUB $n$ ) für  $S$  gebunden.

### Finden der einzelnen Terme der Gleichungen

Der Ausdruck  $e^{-S} H e^S |\Phi\rangle$  enthält nun nur noch Terme mit Produkten von  $s^+$ -Operatoren und keine Terme mit  $s^z$ - und  $s^-$ -Operatoren. Um die Ket-Gleichung

$$\langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- \cdots s_{j_M}^- e^{-S} H e^S | \Phi \rangle$$

der Konfiguration  $j_1 j_2 \cdots j_M$  zu erzeugen, müssen jetzt alle Terme des Ausdruckes  $e^{-S} H e^S |\Phi\rangle$  gefunden werden, bei denen die  $s^+$ -Operatoren die gleichen Indizes haben wie die Konfiguration, die Indizes müssen also gleich  $j_1 j_2 \cdots j_M$  sein. Wegen

$$\langle \Phi | s_i^- s_j^+ | \Phi \rangle = \delta_{ij}$$

bilden genau diese Terme die Ket-Gleichung, alle anderen sind Null. In der praktischen Implementierung werden alle Terme in (3.28) einzeln analysiert, und für jeden dieser Terme werden alle seine Beiträge zur Ket-Gleichung auf systematische Weise gesucht [45]. Die Vorgehensweise läßt sich durch konkrete Beispiele am besten verdeutlichen.

Es wird  $j_1 j_2 j_3 j_4$  betrachtet, das ist eine konkrete fundamentale Konfiguration (in  $LSUBn$ ) auf dem Gitter. Um die Ket-Gleichung dieser Konfiguration zu bestimmen, müssen die einzelnen Terme in Gl. (3.28) gesondert betrachtet werden. Einer dieser Terme ist z.B.  $F_k F_m |\Phi\rangle$  mit

$$F_k F_m = \sum_{l_1 l_2} \sum_{i_1 \dots i_{l_1}} \sum_{n_1 \dots n_{l_2}} (l_1 + 1)(l_2 + 1) [k i_1 \dots i_{l_1}] [m n_1 \dots n_{l_2}] s_{i_1}^+ \dots s_{i_{l_1}}^+ s_{n_1}^+ \dots s_{n_{l_2}}^+.$$

Es muß nun  $\langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- s_{j_3}^- s_{j_4}^- F_k F_m |\Phi \rangle$  bestimmt werden. Offensichtlich können dabei nur die Terme von  $F_k F_m$  beitragen, die ein Produkt von genau vier Spin-Erzeugungsoperatoren enthalten, d.h. es muß  $l_1 + l_2 = 4$  gelten. Damit sind die möglichen Werte von  $l_1$  und  $l_2$  eingeschränkt, es ist nur  $(l_1 = 0, l_2 = 4)$ ,  $(1, 3)$ ,  $(2, 2)$ ,  $(3, 1)$  und  $(4, 0)$  mit der Bedingung  $l_1 + l_2 = 4$  vereinbar. Für den Fall  $(l_1 = 1, l_2 = 3)$  gilt dann

$$\begin{aligned} \langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- s_{j_3}^- s_{j_4}^- F_k F_m |\Phi \rangle &= (l_1 + 1)(l_2 + 1)(l_1!)(l_2!) \{ [k j_1] [m j_2 j_3 j_4] \\ &+ [k j_2] [m j_1 j_3 j_4] + [k j_3] [m j_1 j_2 j_4] + [k j_4] [m j_1 j_2 j_3] \}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

und analog für die anderen Werte von  $l_1$  und  $l_2$ . Die Faktoren  $(l_1!)$  und  $(l_2!)$  entsprechen den möglichen Permutationen der entsprechenden Indizes.

Jetzt wird die Summation über die Spins des Gitters, d.h. über  $k$  und  $m$  ( $k$  und  $m$  sind nächste Nachbarn) durchgeführt. Dabei muß festgestellt werden, ob die Konfigurationen aus (A.4) (z.B.  $k j_1$  und  $m j_2 j_3 j_4$ ) zu den fundamentalen Konfigurationen (der entsprechenden  $LSUBn$ -Näherung) gehören, und wenn das der Fall ist, welcher fundamentalen Konfiguration sie entsprechen. Die Koeffizienten von Konfigurationen, die nicht zu den fundamentalen Konfigurationen gehören, sind Null und tragen somit nicht zu den Ket-Gleichungen bei, die anderen bilden dann entsprechend die Terme der Ket-Gleichungen. Da die fundamentalen Konfigurationen für  $LSUBn$  nur eine endliche Größe auf dem Gitter haben, gibt es auch nur eine endliche Anzahl von  $k$ - und  $m$ -Werten bei denen (A.4) nicht verschwindet, die also zu den Ket-Gleichungen beitragen.

Als weiteres Beispiel wird  $\langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- s_{j_3}^- s_{j_4}^- F_k F_m s_k^+ s_m^+ |\Phi \rangle$  betrachtet. Hier muß die Vorgehensweise etwas abgewandelt werden, da auch  $s^+$ -Operatoren mit den Indizes  $k$  bzw.  $m$  vorkommen. Dadurch werden die mögliche Werte von  $k$  und  $m$  von vornherein auf die Indizes  $j_1$  bis  $j_4$  beschränkt, es kann nur  $(k = j_1, m = j_2)$ ,  $(j_1, j_3)$ ,  $(j_1, j_4)$ ,  $(j_2, j_3)$ ,  $(j_2, j_4)$ ,  $(j_3, j_4)$  und den entsprechenden Umkehrungen  $(k = j_2, m = j_1)$  usw. gelten. Die Summation über  $l_1$  und  $l_2$  in  $F_k F_m$  ist jetzt auf die Terme mit  $l_1 + l_2 = 2$  beschränkt. Für den Fall  $(k = j_1, m = j_2)$  und  $(l_1 = 2, l_2 = 0)$  folgt dann z.B.

$$\langle \Phi | s_{j_1}^- s_{j_2}^- s_{j_3}^- s_{j_4}^- F_k F_m s_k^+ s_m^+ |\Phi \rangle = (l_1 + 1)(l_2 + 1)(l_1!)(l_2!) [k j_3 j_4] [m],$$

analog müssen die anderen Fälle betrachtet werden. Zum Schluß müssen die Konfigurationen wie  $kj_3j_4$  usw. den fundamentalen Konfigurationen zugeordnet werden, wenn sie nicht zu ihnen gehören tragen sie nicht zu den Ket-Gleichungen bei.

Zum Schluß eine Bemerkung zur *Speicherung der Ket-Gleichungen*. Da die Bestimmung der Ket-Gleichungen z.T. lange Rechenzeiten mit dem Computer erfordert, werden sie für das  $J$ - $J'$ -Modell für jede einzelne LSUB $n$ -Näherung für den Néel-Modellzustand ( $\Phi = 0$ ) und für den allgemeinen helixartigen Zustand ( $\Phi \neq 0$ ) je einmal bestimmt, und dann abgespeichert. Die Lösung dieser Gleichungen erfolgt dann mit einem anderen Programm für die verschiedenen Werte der Parameter  $J$  und  $\Phi$  des Modells, bzw. des Modellzustandes.

Die Speicherung dieser Gleichungen vereinfacht sich, da sie für *alle* CCM-Näherungen eine Linearkombination von Produkten von maximal vier (verschiedenen oder auch gleichen) Korrelationskoeffizienten darstellen. Das ergibt sich sofort aus Gl. (3.28), welche nur Terme mit Produkten von höchstens vier  $F_k$  und/oder  $G_{km}$  enthält (und die  $F_k$  und  $G_{km}$  linear in den Korrelationskoeffizienten sind).<sup>5</sup>

### A.3 SUB2-Näherung mit Néel-Modellzustand

Hier wird die SUB2-Näherung für das  $J$ - $J'$ -Modell (2.1) im Grundzustand kurz behandelt. Für weitere Einzelheiten zur SUB2-Näherung für Spinsysteme s. Ref. [39].

In der SUB2-Näherung (s. auch Gl. (3.20)) enthält der Korrelationsoperator  $S$  bis zu zwei Spins in beliebigem Abstand auf dem Gitter. Hier soll ausschließlich der Néel-Modellzustand ( $\Phi = 0$ ) verwendet werden, es gibt dann also nur Konfigurationen mit genau zwei Spins (Erhaltung von  $s_i^z$ , s. Abschnitt 3.2.2). Bezeichnet  $b_r$  den Korrelationskoeffizienten zweier Spins im Abstand  $r$  (es ist zu beachten, daß  $r$  hier (in 2D) ein Vektor ist) so ist

$$S = \sum_{i \in A} \sum_{r \neq 0} b_r s_i^+ s_{i+r}^+ \quad (\text{A.5})$$

der Ansatz für  $S$  in SUB2. Die Summation über  $r$  erfolgt über alle Gittervektoren, d.h. über alle Abstände die zwei Spins haben können.

#### Ket-Grundzustand

Die Ket-Gleichungen für die Koeffizienten  $b_r$  sind

$$2 \langle s_i^- s_{i+r}^- e^{-S} H e^S \rangle = - \sum_p (1 + \delta_{p,p'} (J' - 1)) \left[ \sum_{r'} b_{r'} b_{r-r'+p} - 2(1 + 2b_p) b_r + (1 + 2b_p + 2b_p^2) \delta_{p,r} \right] = 0 \quad (\text{A.6})$$

Es gibt drei verschiedene nächste-Nachbar-Koeffizienten  $b_p$ , deren Konfigurationen mit den drei LSUB2-Konfigurationen des Modells identisch sind. Der Ausdruck (A.6)

---

<sup>5</sup>Tatsächlich enthält (3.28) nur genau einen Term (nämlich  $F_k^2 F_m^2 s_k^+ s_m^+$ ) der zu Produkten von vier Korrelationskoeffizienten führt.

ist ein nichtlineares Gleichungssystem für die  $b_r$ , das mittels einer *Fouriertransformation* [39] gelöst werden kann. Dazu wird (A.6) mit  $e^{irq}$  multipliziert, und dann über  $r$  summiert, mit

$$\Gamma(q) \equiv \sum_r e^{irq} b_r, \quad \Rightarrow b_r = \int_{-\pi}^{\pi} d^2q (2\pi)^{-2} e^{-irq} \Gamma(q), \quad \gamma_p(q) \equiv e^{ipq}$$

folgt dann für Gl. (A.6)

$$a\Gamma^2(q) + b\Gamma(q) + c = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\text{mit } a \equiv \sum_p (1 + \delta_{p,p_{J'}}(J' - 1))\gamma_p(-q), \quad b \equiv -\sum_p (1 + \delta_{p,p_{J'}}(J' - 1))2(1 + 2b_p),$$

$$c \equiv \sum_p (1 + \delta_{p,p_{J'}}(J' - 1))(1 + 2b_p + 2b_p^2)\gamma_p(q).$$

Wird nun die Gl. (A.7) nach  $\Gamma(q)$  aufgelöst,

$$\Gamma(q) = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a},$$

erhält man eine selbstkonsistente Gleichung für die  $b_p$ . Diese wird iterativ gelöst, und mit der so erhaltenen Funktion  $\Gamma(q)$  sind auch die  $b_r$  (für beliebiges  $r$ ) bestimmt. Für die Grundzustandsenergie (3.7) folgt aus (A.6)

$$\langle \Phi | e^{-S} H e^S | \Phi \rangle = -\frac{N}{8} \sum_p (1 + \delta_{p,p_{J'}}(J' - 1)) [1 + 2b_p]. \quad (\text{A.8})$$

### Bra-Grundzustand

Der Bra-Korrelationsoperator ist

$$\tilde{S} = 1 + \sum_{i \in A} \sum_{r \neq 0} \tilde{b}_r s_i^- s_{i+r}^-.$$

Mit  $\bar{H} = \langle \Phi | \tilde{S} e^{-S} H e^S | \Phi \rangle$  folgt ein lineares Gleichungssystem für die  $\tilde{b}_r$  (Bra-Zustandsgleichungen),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{H}}{\partial b_r} &= -\frac{N}{4} \sum_p (1 + \delta_{p,p_{J'}}(J' - 1)) \left[ 2 \sum_{r'} \tilde{b}_{r'} b_{r'-r+p} - 2(1 + 2b_p) \tilde{b}_r \right. \\ &\quad \left. + [1 + 2(1 + 2b_p) \tilde{b}_p - 4 \sum_{r'} \tilde{b}_{r'} b_{r'}] \delta_{p,r} \right] = 0 \end{aligned}$$

Eine analoge Fouriertransformation wie für die Ket-Gleichungen führt zu einem System von 4 linearen Gleichungen der Form

$$(A_{ij})(D_i) = (v_i) \quad i, j = 1..4,$$

$$\text{mit } v_i \equiv 1 + \delta_{p_i, p_{J'}}(J' - 1) \quad (p_i \text{ ist Vektor zum } i\text{-ten nächsten Nachbarn),$$

und der Matrix  $A_{ij} \equiv v_i \int_{-\pi}^{\pi} d^2q (2\pi)^{-2} [4\Gamma(-q) - 2(1 + 2b_{p_i})\gamma_{p_i}(-q)] \gamma_{p_j}(q) F(q) - \delta_{ij}$ ,

$$\text{mit } F^{-1}(q) \equiv \sum_{i=1}^4 [2v_i \gamma_{p_i}(q) \Gamma(-q) - 2v_i(1 + 2b_{p_i})].$$

Der Vektor  $(D_i)$  ist die Lösungen dieses linearen Gleichungssystems, mit ihm ergibt sich (ähnlich wie für den Ket-Zustand)

$$\sum_r e^{irq} \tilde{b}_r \equiv \tilde{\Gamma}(q) = F(q) \sum_{i=1}^4 D_i \gamma_{p_i}(q),$$

woraus sich dann die  $\tilde{b}_r$  bestimmen lassen.

Für die Untergitter-Magnetisierung folgt weiter

$$m = -\langle \tilde{\Psi} | s_i^z | \Psi \rangle = \frac{1}{2} - \sum_r \tilde{b}_r b_r = \frac{1}{2} - \int_{-\pi}^{\pi} d^2q (2\pi)^{-2} \tilde{\Gamma}(q) \Gamma(-q).$$

# Anhang B

## Grundzustand quadratischer bosonischer Systeme mittels CCM

Hier wird eine einfache Implementierung der CCM zur exakten Diagonalisierung quadratischer (d.h. wechselwirkungsfreier) bosonischer Hamiltonoperatoren beschrieben.<sup>1</sup> Die Vorgehensweise wurde auch in einer Veröffentlichung [71] kurz dargestellt.

Bei den zu untersuchenden Systemen ist die Anzahl der Bosonen je Platz unbegrenzt. Es handelt sich also [34] um eine bosonische Feldtheorie mit den bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $a_i^+$  bzw.  $a_i$  im Hamiltonoperator. Da es verschiedene Boseoperatoren (hier mit dem Index  $i$  bezeichnet) gibt, spricht man auch von einer Feldtheorie mit mehreren Moden.

### Formalismus

Zunächst muß die Menge  $\{|\Phi\rangle; C_I^+\}$ , d.h. ein geeigneter Modellzustand mit dazugehörigem Satz von Erzeugungsoperatoren definiert werden. Natürlicherweise wird der bosonische Vakuumzustand  $|0\rangle$  als CCM-Modellzustand verwendet, und die bosonischen Erzeugungsoperatoren für die einzelnen Plätze und Produkte von ihnen als dazugehörige verallgemeinerte Erzeugungsoperatoren. Sie erfüllen alle die nötigen Relationen, z.B. gilt

$$a_i|0\rangle = 0, \quad \langle 0|a_i a_j^+|0\rangle = \delta_{ij}.$$

Damit ist der Ket- und Bra-Grundzustand des beschriebenen bosonischen Systems in der SUBL-Näherung [33, 34] (s. auch Gl. (3.5), (3.6) und (3.20)) durch

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= e^S|0\rangle, & S &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_l} A_{i_1, i_2, \dots, i_l} a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \cdots a_{i_l}^+, \\ \langle \tilde{\Psi}| &= \langle 0|\tilde{S}e^{-S}, & \tilde{S} &= 1 + \sum_{i_1, i_2, \dots, i_l} \tilde{A}_{i_1, i_2, \dots, i_l} a_{i_1} a_{i_2} \cdots a_{i_l} \end{aligned} \tag{B.1}$$

gegeben. Die  $A_{i_1, \dots}$  und  $\tilde{A}_{i_1, \dots}$  sind die CCM-Korrelationskoeffizienten, die durch die beiden CCM-Zustandsgleichungen (3.9) und (3.10) bestimmt werden können.

---

<sup>1</sup>Es wird nur der Grundzustand bestimmt. Die Anregungen können ebenfalls mit der CCM berechnet werden, darauf wird hier aber nicht eingegangen.

Am *Beispiel* des einfachen bosonischen Hamiltonoperators mit zwei Plätzen (und den bosonischen Operatoren  $a$  und  $b$ )

$$H = \gamma ab + \gamma^* a^+ b^+ + a^+ a + b^+ b \quad (\text{B.2})$$

wird die Methode zunächst veranschaulicht. Der Korrelationsoperator für den Ket-Grundzustand wird mit  $S = fa^+b^+$  angesetzt ( $f$  und  $\gamma$  sind komplexe Zahlen). Es ist

$$\begin{aligned} e^{-S} a e^S &= a + [a, S]_- + 1/2 [[a, S]_-, S]_- + \dots = a + fb^+, \\ \text{mit } [a, S]_- &= fb^+, \quad [fb^+, S]_- = 0; \quad \text{weiter } e^{-S} a^+ e^S = a^+ \\ \Rightarrow e^{-S} H e^S &= \gamma(a + fb^+)(b + fa^+) + \gamma^* a^+ b^+ + a^+(a + fb^+) + b^+(b + fa^+) \\ \langle 0 | a b e^{-S} H e^S | 0 \rangle &= \gamma f^2 + \gamma^* + 2f \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{Ket-Zustandsgleichung}) \\ &\Rightarrow f = -\frac{1}{\gamma} \pm \frac{1}{\gamma} \sqrt{1 - |\gamma|^2} \\ &\Rightarrow E_0 = \langle 0 | e^{-S} H e^S | 0 \rangle = \gamma f = \pm \sqrt{1 - |\gamma|^2} - 1 \\ \text{Bra-Korrelationsoperator: } \tilde{S} &= \tilde{f} a b + 1 \\ \Rightarrow \tilde{H} = \langle 0 | \tilde{S} e^{-S} H e^S | 0 \rangle &= \gamma f + \tilde{f}(\gamma f^2 + \gamma^* + 2f) \\ \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{f}} = \gamma + 2\gamma f \tilde{f} + 2\tilde{f} &\stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{Bra-Zustandsgleichung}) \\ &\Rightarrow \tilde{f} = -\gamma / (2\gamma f + 2) \end{aligned}$$

Um das richtige (physikalische) Vorzeichen im Ausdruck für  $f$  zu finden, kann man fordern, daß für den Erwartungswert des Teilchenzahloperators  $\langle a^+ a \rangle \geq 0$  gilt.

$$\langle a^+ a \rangle = \langle 0 | \tilde{S} e^{-S} a^+ a e^S | 0 \rangle = \tilde{f} f = \pm \frac{1}{2\sqrt{1 - |\gamma|^2}} \mp \frac{1}{2} \begin{cases} \geq 0 \\ \leq 0 \end{cases}$$

Physikalisch ist also nur das obere Vorzeichen, und man erhält für die Grundzustandsenergie von (B.2)  $E_0 = \sqrt{1 - |\gamma|^2} - 1$ . Dies und die anderen Ergebnisse stimmen mit den Resultaten einer Bogoljubow-Transformation überein, d.h. der Korrelationsoperator  $S = fa^+b^+$  diagonalisiert (B.2) exakt. Das war auch nicht anders zu erwarten, da nach den Ergebnissen der Bogoljubow-Transformation der Ausdruck  $\exp[fa^+b^+]|0\rangle$  der Grundzustand von (B.2) ist (s. auch weiter unten). In der Notation der CCM bedeutet das, daß SUB2 (d.h. Terme mit bis zu zwei Erzeugungsoperatoren in  $S$ ) den Hamiltonoperator des Beispiels exakt diagonalisiert.

Wie nun mittels einer Bogoljubow-Transformation [69] weiter unten gezeigt wird, hat der exakte Grundzustand eines *quadratischen* bosonischen Systems die Form  $|\Psi\rangle = \exp[\sum_{ij} f_{ij} a_i^+ a_j^+] |0\rangle$ . Die gleiche Form hat auch der Ket-Zustand (B.1) in der SUB2-Näherung. Das bedeutet aber nichts anderes, als daß sich ein *quadratischer* bosonischer Hamiltonoperator immer mittels SUB2 *exakt* behandeln läßt.

### Bargmann-Darstellung

Nun muß eine praktische Notation gefunden werden, die sich leicht im Computer implementieren läßt. Eine solche Möglichkeit ist die Bargmann-Darstellung [70, 34], nach der sich bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ( $a^+$ ,  $a$ ) durch *komplexe*

Zahlen ( $z$ ) bzw. deren Ableitungen darstellen lassen. Bei Betrachtung eines Platzes gilt

$$a^+ \Leftrightarrow z, \quad a \Leftrightarrow \frac{d}{dz}, \quad |0\rangle \Leftrightarrow 1, \quad \langle 0| \Leftrightarrow 1 \quad (\text{B.3})$$

bzw. allgemein für den  $n$ -Teilchen Zustand

$$|n\rangle \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n, \quad \langle n| \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{d^n}{dz^n}. \quad (\text{B.4})$$

Die Differentialoperatoren gelten für alle *rechts* von ihnen im gleichen Produkt stehenden Ausdrücke. Damit sind alle Eigenschaften der Boseoperatoren erfüllt, z.B. ist

$$\begin{aligned} a^+|n\rangle &\Leftrightarrow z \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n = \sqrt{n+1} \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} z^{n+1} \Leftrightarrow \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \\ a|n\rangle &\Leftrightarrow \frac{d}{dz} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n = n \frac{z^{n-1}}{\sqrt{n!}} = \sqrt{n} \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} z^{n-1} \Leftrightarrow \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ a^+a|n\rangle &= z n \frac{z^{n-1}}{\sqrt{n!}} \Leftrightarrow n|n\rangle, \quad aa^+|n\rangle = \frac{d}{dz} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^{n+1} \Leftrightarrow (n+1)|n\rangle, \end{aligned}$$

damit gilt die richtige Vertauschungsrelation  $[a, a^+]_- |n\rangle = |n\rangle$ . Weiter ist

$$\langle n|n\rangle \Leftrightarrow \frac{1}{n!} \frac{d}{dz^n} z^n = 1 \quad \text{und} \quad \langle m|n\rangle = 0 \quad \text{für} \quad m > n.$$

Es folgt aber (immer noch für  $m > n$ ) auch

$$\langle n|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \frac{d}{dz^n} z^m = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \frac{m!}{(m-n)!} z^{m-n} \neq 0,$$

was falsch ist, und auch keinen Sinn macht, da in einem Erwartungswert keine Operatoren (hier also  $z$ ) auftreten dürfen. Es wird also eine weitere Regel für die Behandlung von Erwartungswerten (allgemein für eine Funktion  $f(a, a^+)$  bei beliebigen  $n, m$ ) hinzugefügt:

$$\langle n|f(a, a^+)|m\rangle \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{d^n}{dz^n} f\left(\frac{d}{dz}, z\right) \frac{1}{\sqrt{m!}} z^m \Big|_{z=0}, \quad (\text{B.5})$$

d.h. *nachdem* alle Differentiationen usw. ausgeführt wurden, wird  $z = 0$  gesetzt.

Zusammenfassend werden noch einmal die Regeln für die Bargmann-Darstellung bei der Betrachtung von Erwartungswerten im Vakuumzustand (wie hier für die CCM benötigt) angegeben:

$$a^+ \Leftrightarrow z, \quad a \Leftrightarrow \frac{d}{dz}, \quad |0\rangle \Leftrightarrow 1, \quad \langle 0|f(a, a^+)|0\rangle \Leftrightarrow f\left(\frac{d}{dz}, z\right) \Big|_{z=0}. \quad (\text{B.6})$$

Für Systeme mit mehreren Plätzen muß für jeden Platz eine andere Zahl  $z$  genommen werden. So gilt z.B. für (B.2) in Bargmann-Darstellung

$$H \Leftrightarrow \gamma \frac{d}{dz_1} \frac{d}{dz_2} + \gamma^* z_1 z_2 + z_1 \frac{d}{dz_1} + z_2 \frac{d}{dz_2}, \quad S \Leftrightarrow f z_1 z_2$$

$$\Rightarrow \langle 0 | e^{-S} H e^S | 0 \rangle \Leftrightarrow e^{-S} \left( \gamma(f + f^2 z_1 z_2) + \gamma^* z_1 z_2 + 2f z_1 z_2 \right) e^S \Big|_{z_1, z_2=0} = \gamma f.$$

### Beweis, daß SUB2 den exakten Grundzustand liefert

Unter Verwendung der Tatsache, daß eine Bogoljubow-Transformation [69]

$$\beta_\nu = \sum_\mu (u_{\mu\nu}^* a_\mu - v_{\mu\nu}^* a_\mu^+) \quad (\text{B.7})$$

einen quadratischen bosonischen Hamiltonoperator mit den bosonischen Operatoren  $a_i, a_i^+$  exakt diagonalisiert, läßt sich leicht zeigen, daß der Grundzustand dieses Hamiltonoperators die Form  $|\Psi\rangle = \exp[\sum_{ij} f_{ij} a_i^+ a_j^+] |0\rangle$  haben muß. Dazu braucht nur gezeigt zu werden, daß  $\beta_\nu |\Psi\rangle = 0 \forall \nu$ .

Mit der Bargmann-Darstellung (B.6) bekommt man

$$\begin{aligned} \beta_\nu |\Psi\rangle \stackrel{!}{=} 0 &\Leftrightarrow \sum_\mu \left( u_{\mu\nu}^* \frac{d}{dz_\mu} - v_{\mu\nu}^* z_\mu \right) \exp \left[ \sum_{ij} f_{ij} z_i z_j \right] \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall z_i, \\ &\Rightarrow \sum_\mu (u_{\mu\nu}^* 2 \sum_i f_{i\mu} z_i - v_{\mu\nu}^* z_\mu) \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall z_i, \quad \Rightarrow 2 \sum_\mu f_{i\mu} u_{\mu\nu}^* \stackrel{!}{=} v_{i\nu}^*. \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung ist eine Matrix-Gleichung, die immer für bestimmte  $f_{i\mu}$  erfüllt ist.

### Bemerkungen zur Computerimplementierung

Die Implementation im Computer ist sehr einfach, da lediglich Differentiationen, Multiplikationen und Additionen von (in  $z_1, z_2, \dots$ ) polynomialen Ausdrücken durchgeführt werden müssen. Der Ausdruck  $e^S$  bereitet keine Probleme, da z.B.

$$\frac{d}{dz} e^S = \frac{de^S}{dS} \frac{dS}{dz} = e^S \frac{dS}{dz}$$

gilt. Ferner kommen im Exponenten, d.h. in  $S$  keine Differentialoperatoren vor.

Das Programm zum Erzeugen der Ket- und Bra-Grundzustandsgleichungen wurde in Maple<sup>2</sup> implementiert, gelöst wurden diese Gleichungen dann numerisch mit einem C-Programm. Der verwendete Ansatz (SUB2) für ein  $n$ -Platz System mit den Erzeugungsoperatoren  $a_1^+, a_2^+, \dots$  ist

$$S = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} a_i^+ a_j^+.$$

Da  $A_{ij} = A_{ji}$  ergibt das ein System von  $n + (n^2 - n)/2$  nichtlinearen Ket-Gleichungen

$$\langle 0 | a_1 a_1 e^{-S} H e^S | 0 \rangle = 0, \quad \langle 0 | a_1 a_2 e^{-S} H e^S | 0 \rangle = 0, \dots, \langle 0 | a_n a_n e^{-S} H e^S | 0 \rangle = 0.$$

---

<sup>2</sup>Benutzt wurde Maple V Release 3, Copyright (c) 1981-1994 by Waterloo Maple Software and the University of Waterloo.

# Anhang C

## Normalordnen der Dyson-Maleev-Wechselwirkungsterme

Um Spinwellenrechnungen in höheren Ordnungen durchführen zu können, ist es zweckmäßig, die einzelnen Terme mit vier Boseoperatoren so umzuordnen, daß in jedem Term die Erzeugungsoperatoren vor den Vernichtungsoperatoren stehen. Die Terme heißen dann *normalgeordnet*. Wie das Beispiel

$$\alpha_1\beta_3\beta_2^+\alpha_4^+ = \delta_{14}\delta_{23} + \delta_{23}\alpha_4^+\alpha_1 + \delta_{14}\beta_2^+\beta_3 + \beta_2^+\alpha_4^+\beta_3\alpha_1$$

verdeutlicht, treten dabei auch Terme ohne Boseoperatoren und mit zwei Boseoperatoren auf. Für  $V_{\text{DM}}$  nach Gl. (4.23) folgt nach Durchführung der Bogoljubow-Transformation (4.25) und Normalordnen der Terme

$$V_{\text{DM}} = V_{\text{DM}}^{(0)} + V_{\text{DM}}^{(2)} + V_{\text{DM}}^{(4)}, \quad (\text{C.1})$$

d.h.  $V_{\text{DM}}$  läßt sich in Terme ohne, mit zwei und mit vier Boseoperatoren zerlegen, welche alle normalgeordnet sind. Mit der Definition

$$a_1 \equiv \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (|v_{\mathbf{k}}|^2 + e^{-ik_x} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}), \quad a_2 \equiv \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (|v_{\mathbf{k}}|^2 + \mu_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \quad (\text{C.2})$$

folgt für die Terme mit Null und zwei Boseoperatoren

$$V_{\text{DM}}^{(0)} = -2Na_2^2 + N/2(1 - J')a_1^2 = 2N(-a_2^2 + \kappa_0 a_1^2), \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} V_{\text{DM}}^{(2)} = & 4a_2 \sum_{\mathbf{k}} \left[ |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 + \mu_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) \right] (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \\ & - 4a_2 \sum_{\mathbf{k}} \left[ 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + \mu_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^{*2} + v_{\mathbf{k}}^2) \right] \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ + \text{h.c.} \\ & (1 - J')a_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[ |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 + e^{ik_x} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* + e^{-ik_x} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right] (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \\ & (1 - J')a_1 \sum_{\mathbf{k}} \left[ 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} + e^{ik_x} u_{\mathbf{k}}^{*2} + e^{-ik_x} v_{\mathbf{k}}^2 \right] \alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}^+ + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Für die normalgeordneten Viererterme folgt

$$\begin{aligned}
V_{\text{DM}}^{(4)} &= -\frac{2}{N} \sum_{1-4} \Delta(1+2-3-4) \left[ V^{(1)} \alpha_1^+ \alpha_2^+ \alpha_3 \alpha_4 + V^{(2)} \alpha_1^+ \beta_2 \alpha_3 \alpha_4 + \right. \\
&+ V^{(3)} \alpha_1^+ \alpha_2^+ \beta_3^+ \alpha_4 + V^{(4)} \alpha_1^+ \alpha_3 \beta_4^+ \beta_2 + V^{(5)} \beta_4^+ \alpha_3 \beta_2 \beta_1 \\
&+ \left. V^{(6)} \beta_4^+ \beta_3^+ \alpha_2^+ \beta_1 + V^{(7)} \alpha_1^+ \alpha_2^+ \beta_3^+ \beta_4^+ + V^{(8)} \beta_1 \beta_2 \alpha_3 \alpha_4 + V^{(9)} \beta_4^+ \beta_3^+ \beta_2 \beta_1 \right], \tag{C.5}
\end{aligned}$$

wobei die Summation über die Vektoren  $\mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{k}_2$ ,  $\mathbf{k}_3$  und  $\mathbf{k}_4$  über die 1. Brillon-Zone erfolgt. Die neun komplexen Vertex-Funktionen lauten

$$\begin{aligned}
V^{(1)}(1234) &= \mathcal{U}(1234) \left( x_1 [x_4^* (\gamma_{1-4} - x_3^* \gamma_{1-3-4}) - (\gamma_1 - x_3^* \gamma_{1-3})] \right. \\
&+ \left. x_2 [x_4^* (\gamma_{2-4} - x_3^* \gamma_{2-3-4}) - (\gamma_2 - x_3^* \gamma_{2-3})] \right), \\
V^{(2)}(1234) &= 2\mathcal{U}(1234) \left( x_1 x_2^* [x_4^* (x_3^* \gamma_{1-3-4} - \gamma_{1-4}) - (x_3^* \gamma_{1-3} - \gamma_1)] \right. \\
&+ \left. [x_4^* (x_3^* \gamma_{2-3-4} - \gamma_{2-4}) - (x_3^* \gamma_{2-3} - \gamma_2)] \right), \\
V^{(3)}(1234) &= 2\mathcal{U}(1234) \left( x_1 [x_4^* (\gamma_{1-3-4} - x_3 \gamma_{1-4}) - (\gamma_{1-3} - x_3 \gamma_1)] \right. \\
&+ \left. x_2 [x_4^* (\gamma_{2-3-4} - x_3 \gamma_{2-4}) - (\gamma_{2-3} - x_3 \gamma_2)] \right), \\
V^{(4)}(1234) &= 4\mathcal{U}(1234) \left( x_1 x_2^* [x_4 (x_3^* \gamma_{1-3} - \gamma_1) - (x_3^* \gamma_{1-3-4} - \gamma_{1-4})] \right. \\
&+ \left. [x_4 (x_3^* \gamma_{2-4} - \gamma_2) - (x_3^* \gamma_{2-3-4} - \gamma_{2-4})] \right), \\
V^{(5)}(1234) &= 2\mathcal{U}(1234) \left( x_2^* [(x_3^* \gamma_{1-3-4} - \gamma_{1-4}) - x_4 (x_3^* \gamma_{1-3} - \gamma_1)] \right. \\
&+ \left. x_1^* [(x_3^* \gamma_{2-3-4} - \gamma_{2-4}) - x_4 (x_3^* \gamma_{2-3} - \gamma_2)] \right), \\
V^{(6)}(1234) &= 2\mathcal{U}(1234) \left( x_1^* x_2 [x_4 (x_3 \gamma_2 - \gamma_{2-3}) - (x_3 \gamma_{2-4} - \gamma_{2-3-4})] \right. \\
&+ \left. [x_4 (x_3 \gamma_1 - \gamma_{1-3}) - (x_3 \gamma_{1-4} - \gamma_{1-3-4})] \right), \\
V^{(7)}(1234) &= \mathcal{U}(1234) \left( x_1 [x_4 (\gamma_{1-3} - x_3 \gamma_1) - (\gamma_{1-3-4} - x_3 \gamma_{1-4})] \right. \\
&+ \left. x_2 [x_4 (\gamma_{2-3} - x_3 \gamma_2) - (\gamma_{2-3-4} - x_3 \gamma_{2-4})] \right), \\
V^{(8)}(1234) &= \mathcal{U}(1234) \left( x_2^* [(x_3^* \gamma_{1-3} - \gamma_1) - x_4^* (x_3^* \gamma_{1-3-4} - \gamma_{1-4})] \right. \\
&+ \left. x_1^* [(x_3^* \gamma_{2-3} - \gamma_2) - x_4^* (x_3^* \gamma_{2-3-4} - \gamma_{2-4})] \right), \\
V^{(9)}(1234) &= \mathcal{U}(1234) \left( x_2^* [x_4 (\gamma_{1-3} - x_3 \gamma_1) - (\gamma_{1-3-4} - x_3 \gamma_{1-4})] \right. \\
&+ \left. x_1^* [x_4 (\gamma_{2-3} - x_3 \gamma_2) - (\gamma_{2-3-4} - x_3 \gamma_{2-4})] \right),
\end{aligned}$$

dabei ist

$$\mathcal{U}(1234) \equiv u_1 u_2 u_3 u_4, \quad x_{\mathbf{k}} \equiv -v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}} \tag{C.6}$$

mit den Bogoljubow-Koeffizienten  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$ . Der komplexe Gitterstrukturfaktor  $\gamma_{\mathbf{k}}$  ist durch

$$\gamma_{\mathbf{k}} \equiv \mu_{\mathbf{k}} - \frac{1 - J'}{4} e^{-ik_x} = \frac{3 + J'}{4} A_{\mathbf{k}} \tag{C.7}$$

gegeben. Für den Fall des symmetrischen quadratischen Gitters ( $J' = 1$ ) sind die Vertex-Funktionen reell und identisch zu den Dyson-Maleev-Vertizes [81].

# Literaturverzeichnis

- [1] *Microscopic Many-Body Theories and Their Applications*, edited by J. Navarro and A. Polls, Lecture Notes in Physics Vol. **510** (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [2] W. Heisenberg, Z. Phys. **49**, 619 (1928).
- [3] 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).
- [4] E.Lieb and D.C.Mattis, J. Math. Phys. **3**, 749 (1962).
- [5] J. Richter, S.E. Krüger, A. Voigt and C. Gros, Europhys. Lett. **28**, 363 (1994).
- [6] N. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [7] P.W.Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [8] J.Bardeen, L.Cooper, J.R.Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [9] G.Shirane, R.J.Birgeneau, Y.Endoh, M.A.Kastner, Physica B **197**, 158 (1994).
- [10] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).
- [11] G. Castilla, S. Chakravarty, and V.J. Emery. Phys. Rev. Lett., **75**, 1823 (1995).
- [12] H. Kageyama et al. Phys. Rev. Lett., **82**, 3168 (1999).
- [13] J. Richter, Phys. Rev. B **47**, 5794 (1993).
- [14] A. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil, Nucl. Phys. B **426**, 601 (1994).
- [15] J. Oitmaa and Zheng Weihong, Phys. Rev. B **54**, 3022 (1996).
- [16] Y. Xian, Phys. Rev. B **52**, 12485 (1995).
- [17] H. Niggemann, G. Uimin, and J. Zittartz, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 9031 (1997).
- [18] J. Richter, N.B. Ivanov, and J. Schulenburg, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 3635 (1998).
- [19] N.B. Ivanov, J. Richter, and U. Schollwöck, Phys. Rev. B **58**, 14456 (1998).

- [20] A.J. Millis and H. Monien, Phys. Rev. Lett. **70**, 2810 (1993).
- [21] A.W. Sandvik and D.J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **72**, 2777 (1994).
- [22] C. Gros, W. Wenzel, and J. Richter, Europhys. Lett. **32**, 747 (1995).
- [23] A.V. Chubukov and D.K. Morr, Phys. Rev. B **52**, 3521 (1995).
- [24] M. Troyer, H. Kontani, and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **76**, 3822 (1996); M. Troyer, M. Imada, and K. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 2957 (1997).
- [25] S. Sachdev and N. Read, Phys. Rev. Lett. **77**, 4800 (1996).
- [26] M. Albrecht and F. Mila, Phys. Rev. B **53**, R2945 (1996).
- [27] F. Coester, Nucl. Phys. **7**, 421 (1958); F. Coester and H. Kümmel, *ibid.* **17**, 477 (1960).
- [28] J. Čížek, J. Chem. Phys. **45**, 4256 (1966); Adv. Chem. Phys. **14**, 35 (1969).
- [29] R.F. Bishop and K.H. Lührmann, Phys. Rev. B **17**, 3757 (1978).
- [30] H. Kümmel, K.H. Lührmann, and J.G. Zabolitzky, Phys Rep. **36C**, 1 (1978).
- [31] J.S. Arponen, Ann. Phys. (N.Y.) **151**, 311 (1983).
- [32] R.F. Bishop and H. Kümmel, Phys. Today **40(3)**, 52 (1987).
- [33] R.F. Bishop, Theor. Chim. Acta **80**, 95 (1991).
- [34] J.S. Arponen and R.F. Bishop, Theor. Chim. Acta **80**, 289 (1991).
- [35] R.F. Bishop, in *Many-Body Physics*, p. 3 (World Scientific, Singapore 1994).
- [36] R.F. Bishop, in *Recent Progress in Many-Body Theories*, Vol. **4**, p. 195 (1995).
- [37] R.F. Bishop in [1], p. 1.
- [38] M. Roger and J.H. Hetherington, Phys. Rev. B **41**, 200 (1990).
- [39] R.F. Bishop, J.B. Parkinson, and Y. Xian, Phys. Rev. B **43**, 13782 (1991); Theor. Chim. Acta **80**, 181 (1991); Phys. Rev. B **44**, 9425 (1991); in *Recent Progress in Many-Body Theories*, edited by T.L. Ainsworth, C.E. Campbell, B.E. Clements, and E. Krotscheck (Plenum, New York, 1992), Vol. **3**, p. 117.
- [40] R.F. Bishop, R.G. Hale, and Y. Xian, Phys. Rev. Lett. **73**, 3157 (1994).
- [41] R. Bursill, G.A. Gehring, D.J.J. Farnell, J.B. Parkinson, T. Xiang, and C. Zeng, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 8605 (1995).
- [42] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, and J.B. Parkinson, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 11153 (1996).

- [43] D.J.J. Farnell, S.E. Krüger, and J.B. Parkinson, *J. Phys.: Condens. Matter.* **9**, 7601 (1997).
- [44] R.F. Bishop, J. Rosenfeld, *Int. J. Mod. Phys. B* **12**, 2371 (1998).
- [45] C. Zeng, D.J.J. Farnell, and R.F. Bishop, *J. Stat. Phys.*, **90**, 327 (1998).
- [46] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, and J.B. Parkinson, *Phys. Rev. B* **58**, 6394 (1998).
- [47] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, and C. Zeng, *Phys. Rev. B* **59**, 1000 (1999).
- [48] J. Rosenfeld, N.E. Ligterink, and R.F. Bishop, *Phys. Rev. B* **60**, 4030 (1999).
- [49] H. Hellmann, *Acta Physicochimica USSR* **I(6)**, 513 (1935); R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **56**, 340 (1939).
- [50] S. Mertens, *J. Stat. Phys.* **58**, 1059 (1990).
- [51] R.R.P. Singh, M.P. Gelfand, and D.A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2484 (1988).
- [52] N.B. Ivanov, S.E. Krüger, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **53**, 2633 (1996).
- [53] J. Richter, S. Krüger, and N.B. Ivanov, *Physica B* **230-232**, 1028 (1997).
- [54] S.E. Krüger, J. Richter, J. Schulenburg, D.J.J. Farnell, and R.F. Bishop, *eingereicht zu Phys. Rev. B* (1999).
- [55] K. J. B. Lee and P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **42**, 4426 (1990).
- [56] D.D. Betts and J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **48**, 10602 (1993); J. Oitmaa, D.D. Betts, and M. Aydin, *Phys. Rev. B* **51**, 2896 (1995).
- [57] J.P. Rodriguez, J. Bonca, and J. Ferrer, *Phys. Rev. B* **51**, 3616 (1995).
- [58] I. Korenblit, *Phys. Rev. B* **51**, 12551 (1995).
- [59] A. Aharony, R.J. Birgeneau, A. Coniglio, M.A. Kastner, and H.E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
- [60] J. Villain, *J. Phys. C: Solid State* **10**, 4793 (1977).
- [61] K. Emrich, *Nucl. Phys.* **A351**, 379, 397 (1981).
- [62] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, S.E. Krüger, J. Richter, and C. Zeng, *unpublished*.
- [63] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Annals of Phys.* **16**, 407 (1961); siehe z.B. auch Th. Niemeier, *Physica* **36**, 377 (1967); E. Barouch, B.M. McCoy, and *Phys. Rev. A*, **3**, 786 (1971) und B.M. McCoy, *Phys. Rev.*, **173**, 531 (1968).
- [64] D.D. Betts, S. Matsui, N. Vats, and G.E. Stewart, *Can J Phys.*, **74**, 54 (1996).
- [65] H-Q. Ding, *Phys. Rev. B*, **45**, 230 (1992).

- [66] C.J. Hamer, J. Oitmaa, and W. Zheng, Phys. Rev. B, **43**, 10789 (1991).
- [67] S. Zhang and K.J. Runge, Phys. Rev. B, **45**, 1052 (1992).
- [68] W. Zheng, J. Oitmaa, and C.J. Hamer, Phys. Rev. B, **44**, 11869 (1991).
- [69] N. Bogoliubov, J. Phys. (USSR) **11**, 23 (1947); J.H.P. Colpa, Physica **93A**, 327 (1978).
- [70] V. Bargmann, Comm. Pure Appl. Math. **14**, 180, 187 (1961); *ibid.* **20**, 1 (1967); V. Bargmann, P. Butera, L. Girardello, and J.R. Klauder, Rep. Math. Phys. **2**, 221 (1971).
- [71] S.E. Krüger, D. Schmalfuß, and J. Richter, *angenommen bei Acta Physica Polonica A* (1999).
- [72] T.Holstein and H.Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1908 (1940).
- [73] P.W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [74] R. Kubo, Rev. Mod. Phys. **24**, 344 (1953).
- [75] F.J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956); **102**, 1230 (1956); S.V. Maleev, Sov. Phys. JETP **6**, 776 (1958).
- [76] T.Oguchi, Phys. Rev. **117**, 117 (1960).
- [77] E. Rastelli, L. Reatto, and A. Tassi, J.Phys.C: Solid State Phys., **18**, 353 (1985).
- [78] M.Takahashi, Phys. Rev. B **40**, 2494 (1989).
- [79] G. Castilla and S. Chakravarty, Phys. Rev. B **43**, 13687 (1991).
- [80] C.J.Hamer, Z.Weihong, and P.Arndt, Phys. Rev. B **46**, 6276 (1992).
- [81] C.M. Canali and S.M. Girvin, Phys. Rev. B **45**, 7127 (1992).
- [82] C. Bruder, F. Mila, Europhys. Lett. **17**, 463 (1992).
- [83] I.G. Gochev, Phys. Rev. B **49**, 9594 (1994).
- [84] A.V. Dotsenko and O.P. Sushkov, Phys. Rev. B **50**, 13821 (1994).
- [85] J. Richter, N.B. Ivanov, and K.Retzlaff, J. Magn. Magn. Mater. **140-144**, 1609 (1995).
- [86] A.V. Chubukov and D.K. Morr, Phys. Rev. B **52**, 3521 (1995).
- [87] J.B. Parkinson, J.Phys. C **12**, 2873 (1979).
- [88] Y. Xian, J.Phys.: Condens. Matter **6**, 5965 (1994).

- [89] H.Q. Lin, Phys. Rev. B **42**, 6561 (1990).
- [90] D.D. Betts, H.Q. Lin, and J.S. Flynn, *accepted for publication in Can. J. Phys.* (1999).
- [91] H. Neuberger and T. Ziman, Phys. Rev. B **39**, 2608 (1989).
- [92] H.J. Schulz and T.A.L. Ziman, Europhys. Lett. **18**, 355 (1992).
- [93] W. Zheng, J. Oitmaa, and C.J. Hamer, Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991).
- [94] J. Oitmaa, C.J. Hamer, and W.H. Zheng, Phys. Rev. B **45**, 9834 (1992).
- [95] J.D. Reger, J.A. Riera, and A.P. Young, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 1855 (1989).