Einfluß der Gitterstruktur auf den Grundzustand von s=1/2-Quantenspinsystemen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

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

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

von	Diplomphysiker Jörg Schulenburg
geboren am	10. Februar 1969 in Rostock-Warnemünde
Gutachter:	Prof. Dr. Johannes Richter Prof. Dr. Hans-Ulrich Everts Privatdozent Dr. Jürgen Schnack

Eingereicht am: 28.08.2002
Verteidigung am: 23.01.2003

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. J. Richter für die Betreuung dieser Dissertation. Er hat durch vielfältige Anregungen und ständige Diskussionsbereitschaft sehr viel zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe „Theorie der Kondensierten Materie II“ für die gute und freundliche Arbeitsatmosphäre und zahlreiche Diskussionen.

Besonders möchte ich mich auch bei den zahlreichen hier ungenannten Softwareautoren bedanken, die durch die Schaffung eines offenen und frei verfügbaren Betriebssystems und zahlreicher ebenfalls frei verfügbaren Anwendungsprogramme die wissenschaftliche Arbeit erheblich verbessert und vereinfacht haben.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**

1.1 Gegenstand der Arbeit 7

2 Der HAFM auf dem BCC-Gitter **9**

2.1 Einleitung 9

2.2 Erzeugung endlicher bipartiter BCC-Gitterzellen 10

2.3 Topologisch verschiedene endliche Gitterzellen 14

2.4 Der HAFM auf endlichen BCC-Gitterzellen 15

2.5 Abschätzung der Eigenschaften des BCC-Gitters 15

2.6 Zusammenfassung und Ausblick 22

2.7 Der XY-Ferromagnet auf dem BCC-Gitter 23

3 Die Dimer-Plaketten-Kette **29**

3.1 Einführung 29

3.1.1 Das Modell 30

3.2 Der klassische Grundzustand 31

3.3 Der Spin-1/2-Grundzustand 31

3.3.1 Der unfrustrierte Fall $J_f = 0$ 32

3.3.2 Der frustrierte Fall $J_f > 0$ 35

3.4 Singulett-Triplett-Anregungslücke 42

3.4.1 Sprung an der Phasengrenze 44

3.5 Magnetisierung - Plateaus 45

3.6 Zusammenfassung 50

4 Archimedische Tilings **53**

4.1 Magnetische Ordnung in zwei Dimensionen 53

4.2 Archimedische Gitter 54

4.2.1 Verwandtschaften 58

4.3 Bravaisgitter 61

4.3.1 Der HAFM auf dem quadratischen Gitter 61

4.3.2 Der HAFM auf dem Dreiecks-Gitter 71

4.4 Gitter mit Basis 79

4.4.1 Der HAFM auf dem Honigwaben-Gitter 79

4.4.2 Der HAFM auf dem Kagomé-Gitter 85

4.4.3 Der HAFM auf dem T4H- oder Maple-Leaf-Gitter 91

4.4.4 Der HAFM auf dem Trellis-Gitter 98

4.4.5 Der HAFM auf dem TTSTS-Gitter 102

4.4.6 Der HAFM auf dem SOO- oder CaVO-Gitter 108

4.4.7 Der HAFM auf dem TSHS-Gitter 115

4.4.8 Der HAFM auf dem TDD-Gitter 119

4.4.9 Der HAFM auf dem SHD-Gitter 128

4.5 Vergleich der archimedischen Tilings 132

4.5.1 Ordnung oder Unordnung? 132

4.6 Zusammenfassung 136

5 Zusammenfassung und Ausblick **139**

A Der Ordnungsparamter **141**

B Exakte Diagonalisierung **145**

C Néel-Ordnung und endliche Systeme **149**

C.1 Der Pisa-Turm 149

C.2 Darstellung des Energiespektrums 151

D Symmetrien auf dem Quadratgitter **155**

D.1 Punktgruppen . . . 155

D.2 Punktgruppe des Quadratgitters . . . 156

D.2.1 Matrixdarstellung der Punktsymmetrien . . . 156

D.2.2 Gruppentabelle G . . . 157

D.2.3 Äquivalenzklassen . . . 157

D.2.4 Untergruppen $UG \subseteq G$ . . . 159

D.3 Endliche Ausschnitte und periodische Randbedingungen . . . 159

E Darstellung endlicher Gitterzellen **161**

E.1 Betts- und utlf-Notation . . . 161

E.2 Ungünstige Randbedingungen . . . 163

E.3 Endliche Dreiecksgitter . . . 164

F Das BCC-Gitter **167**

F.1 Geometrische und topologische Gleichheit . . . 167

F.2 Geometrische und topologische Imperfektion . . . 169

F.3 Grundzustand endlicher BCC-Gitterzellen . . . 170

G Störungstheorie **175**

G.1 Operator-Störungstheorie . . . 175

G.2 $|J_p| \ll |J_d|$ und $J_p < 0$ . . . 177

G.3 $|J_p| \ll |J_d|$ und $J_p > 0$ . . . 179

G.4 $|J_d| \ll |J_p|$ und $J_p > 0$ . . . 180

Kapitel 1

Einleitung

Eines der fundamentalen Konzepte der theoretischen Physik besteht darin, einfache Modelle zu finden, deren Eigenschaften zu berechnen und zu verstehen, die die gleichen essentiellen Eigenschaften haben, wie physikalische Systeme. Seit der Begründung der Theorie der kondensierten Materie steht die Frage, ob und wie magnetische Ordnung in Vielteilchensystemen zustande kommt. Da realistische Vielteilchenprobleme so gut wie nie exakt behandelbar sind, müssen besonders auch hier vereinfachte Modelle gefunden werden, die eine Behandlung der Probleme erlauben. Da für jede endliche Temperatur streng klassische nichtrelativistische Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht keine magnetische Ordnung aufweisen können (Bohr-van-Leeuwen-Theorem [1]), braucht man zur Beschreibung magnetischer Ordnung ein Modell, das die Elektronen-Spins berücksichtigt, d.h. ein Modell von quantenmechanischer Natur. Ein grundlegendes Quantenmodell, was zur Erklärung verschiedener magnetischer Eigenschaften fester Körper geeignet erscheint, ist das Heisenbergmodell [2]. Das Heisenbergmodell erhält man im Limes großer Coulombabstoßung U aus dem Hubbardmodell [3] mit halber Füllung. Im einfachsten Fall „sitzt“ an jedem Platz genau ein Elektron, welches ein inneres magnetisches Moment s (Spin) trägt. Dann sind alle Elektronen lokalisiert und es findet kein Ladungstransport statt. Damit enthält das Modell nur noch Prozesse, die die Spinausrichtung der lokalisierten Elektronen ändern können.

Das Heisenbergmodell dient zur Beschreibung von isolierenden Festkörpern, bei denen zumindest ein Teil der atomaren Bestandteile magnetische Momente besitzt. Die nichtmagnetischen Bestandteile gehen nur über die Austauschintegrale J (Superaustausch) in das Heisenbergmodell ein. In der Regel erzeugen Austauschprozesse eine antiferromagnetische Kopplung, so daß über J gekoppelte Spins bestrebt sind, sich antiparallel auszurichten. Spezielle Überlagerungen von Austauschwegen ermöglichen aber auch effektive ferromagnetische Kopplungen, die zu parallel ausgerichteten Spins führen [4]. Stärke und Vorzeichen der Kopplungen und Größe der magnetischen Momente entscheiden dann darüber, ob sich das System ferromagnetisch, ferrimagnetisch, antiferromagnetisch oder in komplizierterer Form (z.B. gekippt, spiral) ordnet.

Das reine Heisenbergmodell ist isotrop, d.h. keine Raumrichtung ist ausgezeichnet. Läßt man Anisotropie bezüglich der z- und der xy-Komponente von J zu, so erhält man das XXZ-Modell und in den Grenzfällen das semiklassische Ising-Modell [5] und das XY-Modell.

Der Heisenbergoperator hat eine sehr einfache Form. Dennoch existieren nur wenige exakte Resultate für dieses Modell. Eine der ersten Lösungen wurde von Bethe [6] für die eindimensionale antiferromagnetische Kette in Form des nach ihm benannten Bethe-Ansatzes gefunden. Der analytische Ausdruck für die Energie der Spinkette wurde erst sieben Jahre später veröffentlicht [7] und die Anregungen konnten sogar erst 31 Jahre später beschrieben werden [8].

Der größte Teil solcher, durch das Heisenbergmodell gut beschreibbarer Materialien, dürfte wohl aus der Gruppe der Oxide stammen. Zu den populärsten Mitgliedern der Oxide gehören einige Kuprate, die 1986 und in den folgenden Jahren einen hohen Bekanntheitsgrad erlangten, da sie Supraleitung bis über den technisch bedeutsamen Siedepunkt von Stickstoff zeigen können. Bekannteste Beispiele sind sogenannte geschichtete (layered) Perovskite [1] oder die K_2NiF_4-ähnliche Phase von $La_{2-x}M_xCuO_4$ (M= Ba, Ca oder Sr) und $MBa_2Cu_3O_{7-x}$ (das Metall M ist Y oder eines der Lanthaniden außer Ce, Pr oder Tb) mit einer Doppelschichtstruktur. Beide Klassen von Materialien haben als charakteristische Strukturelemente CuO_2-Schichten.

Da die undotierten Hochtemperatursupraleiter (HTSL) meist Antiferromagnete sind, rückten mit dem hohen Interesse an den Hochtemperatursupraleitern auch die magnetischen Eigenschaften und ein möglicher Zusammenhang zur Supraleitung dieser Materialien in den Blickpunkt der Physik (siehe [71] für eine Übersicht). Im isolierenden Fall sind Löcher an den Cu^{2+}-Ionen lokalisiert, die dadurch $s = 1/2$ haben. Die Cu^{2+}-Ionen bilden zusammen mit den magnetisch neutralen Sauerstoffionen O^{2-} zweidimensionale Gitterebenen, die durch kupferfreie Schichten getrennt sind. Superaustausch über die Sauerstoffionen führt zu einer antiferromagnetischen Kopplung benachbarter Kupferspins. Die einfachste Beschreibung der magnetischen Eigenschaften ermöglicht das Heisenbergmodell auf dem Quadratgitter mit antiferromagnetischer Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn. Durch Superaustausch über mehrere Ionen können auch Kopplungen übernächster Cu-Nachbarn auftreten. Das zugehörige J_1-J_2-Modell ist ein kanonisches Modell für zweidimensionale geometrisch frustrierte Systeme. Die Frustration wirkt der antiferromagnetischen Ordnung des Gitters entgegen. Die Grundzustandseigenschaften dieses Modells sind auch gegenwärtig noch Gegenstand intensiver Studien.

Frustration kann auch entstehen, wenn die magnetisch aktiven Atome bestimmte geometrische Anordnungen haben. Ein einfaches Beispiel für eine solche frustrierende Anordnung ist das Dreiecksgitter.

Das Heisenberg-Modell bewies erst in jüngerer Zeit wieder seine Relevanz zur Beschreibung von magnetischen Eigenschaften realer Systeme als zweidimensionale ($s = 1/2$)-Systeme experimentell untersucht wurden, die eine Anregungslücke besitzen. Dabei handelt es sich zum einen um CaV_4O_9, dessen Suszeptibilität χ für tiefe Temperaturen einen exponentiellen Verlauf ($\chi(T \to 0) \propto \exp(-\Delta/kT)$) zeigt [124] und $SrCu_2(BO_3)_2$, das ebenfalls einen exponentiellen Verlauf der Suszeptibilität $\chi(T)$ aufweist [24] und das auch durch Plateaus in der Magnetisierungskurve [24] bekannt wurde. Mit Hilfe des Heisenberg-Modells lassen sich sowohl das Spingap als auch die Plateaus sehr gut erklären [123]. Mit diesen Materialien verwandte Strukturen sind unter anderen auch Gegenstand dieser Arbeit und Motivation für ein in dieser Arbeit ebenfalls behandeltes eindimensionales Modell.

Wie bereits erwähnt, ist der Heisenbergoperator [2] ein grundlegender und nichtsdestotrotz ein-

[1] Perovskite sind Materialien mit der generellen Formel ABX_3, wobei A und B Kationen und X ein Anion, typischerweise O oder F, ist. Die Position der Atome sind A bei (0,0,0), B bei (1/2,1/2,1/2) und X bei (1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2) und (0,1/2,1/2). Die B's sitzen in den Zentren von regulär angeordneten X-Oktaeder. Im Zentrum des Raumes zwischen den X-Oktaeder sitzen die A-Atome. Perovskite können durch kippen der Oktaeder 23 mögliche Strukturen annehmen [9].

facher Operator zur Beschreibung quantenmechanischer magnetischer Systeme. Er ist als

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \tag{1.1}$$

mit den Spinoperatoren $\mathbf{S}_i = (S_i^x \mathbf{e}_x + S_i^y \mathbf{e}_y + S_i^z \mathbf{e}_z)$ definiert. Die Komponenten des Spinoperators $\mathbf{S}_i$ genügen den für quantenmechanische Drehimpulse üblichen Vertauschungsrelationen. J_{ij} ist die Austauschwechselwirkung zwischen den Spins benachbarter Plätze i und j. Negative Austauschintegrale $J < 0$ stehen für den Fall ferromagnetischer Kopplung, positive Austauschintegrale $J > 0$ für antiferromagnetische Kopplung. Die „Länge“ der Spins s ist über $\langle \mathbf{S_i^2} \rangle = s(s+1)$ definiert. Für $s \to \infty$ erhält man das klassische Spinmodell, auch mit O(3)-Modell bezeichnet. Das andere Extrem mit $s = 1/2$ ist der Fall maximaler Quantenfluktuationen und soll in dieser Arbeit vor allem betrachtet werden.

1.1 Gegenstand der Arbeit

Zentraler Gegenstand der Arbeit ist die Behandlung niedrigdimensionaler Quantenspinsysteme mit der Methode der exakten Diagonalisierung. Der Schwerpunkt liegt dabei in Kapitel 4 auf einer Klasse zweidimensionaler Spingitter mit antiferromagnetischer Wechselwirkung zwischen den auf den Gitterpunkten sitzenden Spins. Diese werden bezüglich ihrer Grundzustandseigenschaften und der tiefliegenden Anregungen untersucht. Vom besonderen Interesse ist dabei die Frage, ob der Grundzustand magnetisch geordnet oder ungeordnet ist.

Dem Schwerpunktkapitel 4 sind die Kapitel 2 und 3 vorangestellt, in denen die derzeitigen Möglichkeiten der in dieser Arbeit hauptsächlich verwendeten Methode der exakten Diagonalisierung endlicher Systeme ausgelotet werden sollen. Eines der Kapitel, Kapitel 2, befaßt sich mit dem Heisenberg-Antiferromagneten auf einem dreidimensionalen Gitter. Dreidimensionale Gitter sind für die exakte Diagonalisierung besonders schwer zugänglich, da die erreichten Systemausdehnungen sehr klein sind. Durch Verwendung unterschiedlicher Randbedingungen soll dieser Nachteil kompensiert werden.

Ein anderes Kapitel behandelt eine eindimensionale Kette, die Strukturelemente enthält, die auch in den zweidimensionalen Gittern wiedergefunden werden können. Bei diesem Modell können eine Reihe exakter Lösungen auch für den thermodynamischen Grenzfall gefunden werden. Zu diesem Modell wird auch die Magnetisierungskurve berechnet, die interessante Eigenschaften zeigt.

Wie bereits erwähnt, werden in dieser Arbeit hauptsächlich durch exakte Diagonalisierung gewonnene Daten verwendet. Näheres zur Technik ist in Anhang B beschrieben. Mit dem verwendeten Lanczosverfahren können die niedrigsten Eigenwerte und die zugehörigen Eigenfunktionen der Hamiltonmatrix für endliche Systeme gewonnen werden. Diese sind bis auf sehr geringe numerische Fehler *exakt* und liefern eine strenge Beschreibung der Physik endlicher Systeme (z.B. magnetischer Moleküle). Da keine Näherungen zur Lösung der Eigenwertgleichungen notwendig sind, müssen auch keine Fragen zum Einfluß von Näherungen auf die berechneten Resultate diskutiert werden.

Da die exakte Diagonalisierung auf endliche Systeme beschränkt ist, liegt das wesentliche Problem bei der Beschreibung makroskopischer Festkörper in der Extrapolation von Daten endlicher Systeme auf den thermodynamischen Limes, der für den Festkörper-Physiker von eigentlichem Interesse ist. In Kapitel 2 werden deshalb die Möglichkeiten der exakten Diagonalisierung endlicher Systeme ausgelotet, indem ein dreidimensionales System untersucht wird, was für gleiche Systemgrößen N weit schwieriger zu extrapolieren ist als zwei- oder eindimensionale Systeme. Trotzdem sind die Ergebnisse zufriedenstellend und ermuntern zur Anwendung der exakten Diagonalisierung auf komplexere zweidimensionale Systeme. Wo es möglich ist, werden die numerischen Daten mit anderen Ergebnissen oder Methoden verglichen und auf Plausibilität geprüft. Trotzdem können, insbesondere zu Modellen mit großen Einheitszellen, mitunter keine zuverlässigen Extrapolationen vorgenommen werden. Hier bestehen Ansatzmöglichkeiten für weitere Untersuchungen mit veränderten Randbedingungen (z.B. „twisted boundary conditions"), ausgefeilterer Statistik (Ausblick im Abschnitt 2.6) oder besseren Computern und Algorithmen (Parallelrechner, siehe Anhang B).

In der vorliegenden Arbeit wird demonstriert, daß die universelle Methode der exakten Diagonalisierung zu schlüssigen Aussagen führt. Bei komplizierten Gitterstrukturen stößt diese Methode an ihre Grenzen, die sich durch Fortschritte in der Rechentechnik und immer ausgefeilteren Programmcode jedoch ständig erweitern.

Kapitel 2

Der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem BCC-Gitter

2.1 Einleitung

Im folgenden Kapitel soll die exakte Diagonalisierung endlicher Systeme zur Abschätzung der Grundzustandseigenschaften ($T = 0$) des Spin-1/2-Heisenberg-Antiferromagneten (HAFM) auf dem kubisch raumzentrierten Gitter (BCC = body centered cubic, Bild 2.1) angewendet werden. Die exakte Diagonalisierung ist jedoch auf relativ kleine Gitterausschnitte begrenzt, da der Berechnungsaufwand mit wachsender Systemgröße N stark steigt. Auf heute verfügbaren Rechnern können derzeit Spin-1/2-Systeme bis zu einer Größe von etwa $N = 36$ berechnet werden. Diese Zahl erscheint sehr klein, insbesondere unter dem Aspekt, daß die Ausdehnung solcher endlicher dreidimensionaler Systeme nur $L \propto N^{-1/3}$ ist und damit Randeffekte sehr groß sind. Reale physikalische Systeme enthalten Teilchenmengen von ca. 10^{23}. Andere numerisch orientierte Näherungsmethoden wie zum Beispiel die decoupled-cell-Quanten-Monte-Carlo-Methode (DCM) [1] kommen zu Teilchenzahlen von $N = 10^4$.

Das folgende Kapitel soll zeigen, daß trotz dieser Beschränkungen sehr gute Ergebnisse erzielt werden können. Dazu werden möglichst viele Gitterzellen [2] mit zwischen $16 \leq N \leq 32$ Gitterplätzen und periodischen Randbedingungen generiert. Dann werden die Grundzustandseigenschaften dieser endlichen Systeme berechnet und zur Extrapolation zum thermodynamischen Limit herangezogen.

Das Finite-Size-Verhalten von Antiferromagneten wird durch masselose Magnonanregungen dominiert [41, 42, 43]. Mit dieser Annahme läßt sich mit effektiven Lagrangeformulierungen ein systematischer Weg zur Berechnung der führenden Ordnungen finden. Unter Anwendung der chiralen Störungstheorie zeigen Hasenfratz und Niedermayer [44], daß die niedrigsten Ordnungen von nur wenigen Parametern abhängen. Diese Konstanten sind die Spinwellengeschwindigkeit v, die Spinsteifigkeit ρ_s und die "staggered" Magnetisierung m^+ (siehe Anhang A). Statt dieser

[1] Die DCM ist eine der wenigen QMC, die kein Vorzeichenproblem haben. C.J.Sisson und R.J.Creswick präsentieren DCM Rechnungen am SC-Gitter bis zu 24^3 Spins und 8 Spin großen Zellen (Springer Proceedings in Physics, Vol.76, p204 (1993)).

[2] In dieser Arbeit verwende ich die Begriffe Gitterausschnitt oder Gitterzelle synonym.

Parameter findet man in der Literatur [45] auch die drei mikroskopischen Parameter κ_1, κ_2 und v. Hinzu kommen zwei durch das Gitter bestimmte Strukturkonstanten β und γ. Spinwellentheorie kann teilweise gute Abschätzungen für diese Parameter geben. In diesem Kapitel sollen diese physikalischen Parameter durch Finite-Size-Abschätzungen von Daten, die mittels exakter Diagonalisierung gewonnen wurden, bestimmt werden.

Im ersten Abschnitt soll beschrieben werden, wie endliche Gitterzellen für das BCC-Gitter systematisch erzeugt und beschrieben werden können. Es werden Kriterien angegeben, die den Satz dieser Gitterzellen reduzieren, indem ungeeignete Gitterzellen aussortiert werden. Der zweite Abschnitt beschreibt, wie topologisch äquivalente Gitterzellen bestimmt werden können, um den Berechnungsaufwand zu reduzieren. Am Ende bleiben 42 Gitterzellen mit $16 \leq N \leq 32$ Plätzen, die für die Bestimmung der Grundzustandseigenschaften zur Verfügung stehen. In den zentralen Abschnitten wird die Berechnung der Grundzustände der Gitterzellen beschrieben und auf die Extrapolation der Daten endlicher Systeme zum thermodynamischen Limes eingegangen. Mit Hilfe statistischer Methoden werden einige Gitterzellen als Ausreißer klassifiziert, so daß am Ende 31 verschiedene Gitterzellen in der Extrapolation berücksichtigt werden.

Am Ende dieses Kapitels werden die Ergebnisse dieser Arbeit mit Ergebnissen aus anderen Methoden verglichen.

2.2 Erzeugung endlicher bipartiter BCC-Gitterzellen

In diesem Abschnitt soll beschrieben werden, wie endliche Gitterzellen auf dem BCC-Gitter systematisch erzeugt werden können. Mit wenigen Änderungen lässt sich der hier beschriebene Weg auch für andere Systeme verwenden. So kann diese Methode beispielsweise auch für das ebenfalls in dieser Arbeit beschriebene quadratische Gitter verwendet werden.

Das unendlich ausgedehnte BCC-Gitter läßt sich durch drei von acht primitiven Basisvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= (-1,+1,+1)\cdot a/2 \\ \mathbf{a}_2 &= (+1,-1,+1)\cdot a/2 \\ \mathbf{a}_3 &= (+1,+1,-1)\cdot a/2 \end{aligned} \tag{2.1}$$

aufspannen. Dabei ist a die Kantenlänge der einfachsten kubischen Zelle, durch die sich das Gitter aufbauen läßt. Damit jeder Gitterplatz durch ein Tripel ganzer Zahlen beschrieben wird, sei hier die Länge mit $a = 2$ definiert. Jede ganzzahlige Linearkombination dieser Basisvektoren $\mathbf{a}_\beta$ definiert dabei einen Gitterpunkt

$$\mathbf{l} = \sum_{\beta=1}^{3} n_\beta \mathbf{a}_\beta, \qquad n_\beta \in \mathcal{G} \tag{2.2}$$

des raumzentrierten Gitters mit ganzzahligen n_β. Definiert man nun ein Parallelepiped mit den drei Vektoren

$$\mathbf{L}_i = \sum_{\beta=1}^{3} n_{i\beta}\mathbf{a}_\beta = \sum_{j=1}^{3} l_{ij}\mathbf{e}_j = (l_{i1}, l_{i2}, l_{i3}), \qquad n_{i\beta}, l_{ij} \in \mathcal{G}, \tag{2.3}$$

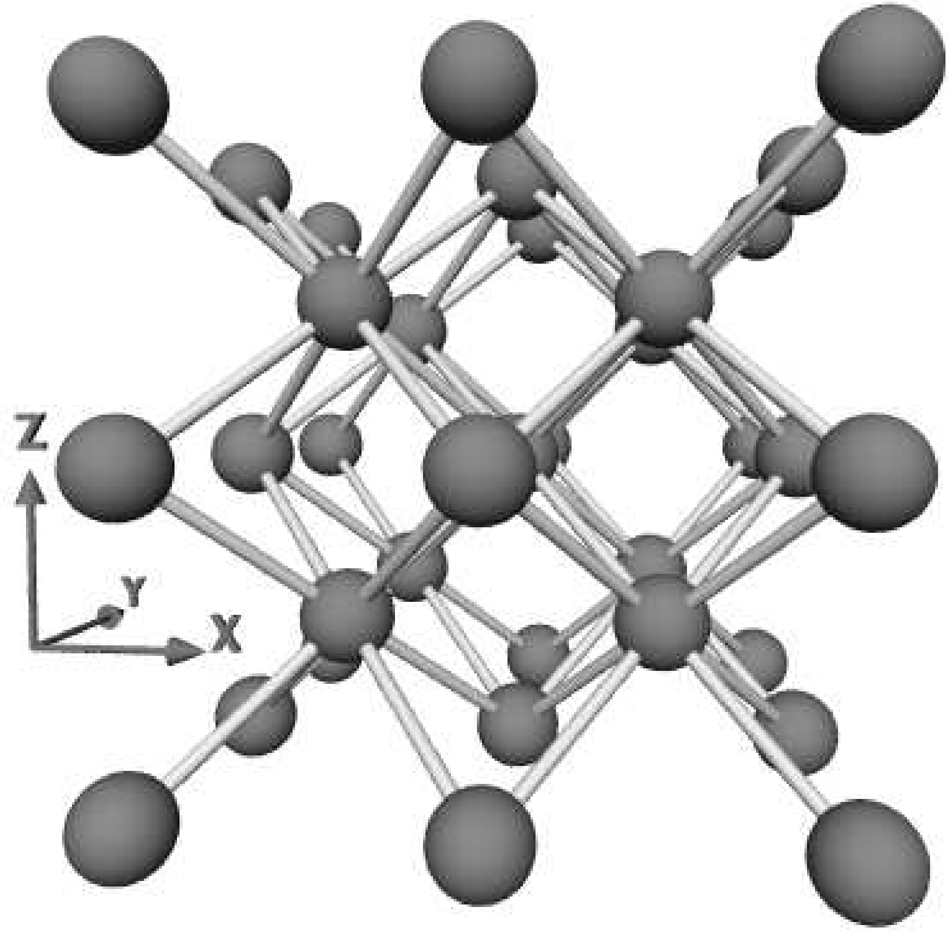


Abbildung 2.1: Kubischer 4x4x4-Ausschnitt eines BCC-Gitters

so läßt sich der gesamte Raum periodisch mit diesen Parallelepipeden füllen. Sie beschreiben dann eine dem BCC-Gitter aufgezwungene periodische Randbedingung. Erfüllen zwei Matrizen L_1 und L_2 mit den Elementen l_{ij} die Matrixgleichung

$$L_1 \cdot L_2^{-1} = U \quad , \tag{2.4}$$

mit U als ganzzahliger Matrix, so beschreiben die beiden durch L_1 und L_2 definierten Parallelepipede dieselben Gitterausschnitte. Es gibt also viele Darstellungsmöglichkeiten für dieselben Gitterausschnitte. Für die systematische Generierung ist es jedoch nachteilig, wenn ein und dieselbe Gitterzelle mehrfach beschrieben werden kann.

Ein einfacher Weg, verschiedene endliche Gitterzellen zu erzeugen, besteht darin, nur Randvektoren $\mathbf{L}_i$ zu benutzen, deren Komponenten folgenden Bedingungen genügen

$$\begin{array}{lll} l_{ii} \geq 1 & i = 1, 2, \ldots, n & \\ l_{ij} = 0 & 1 \leq j < i \leq n & n = 3. \\ l_{ij} \in [0, l_{jj}) & 1 \leq i < j \leq n & \end{array} \tag{2.5}$$

Da nur das obere Dreieck der Matrix l_{ij} von Null verschiedene Werte enthält, nennt man diese Matrixform "utlf"-Darstellung (upper triangular lattice form [33, 35, 36]).

$$L^{utlf} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ 0 & l_{22} & l_{23} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

Sie ermöglicht eine einfache Generierung aller endlichen Gitterzellen mit dem Volumen $4N = \det(L)$. Bild 2.2 veranschaulicht die utlf-Darstellung anhand eines Quader-Mauerwerkes. Alle Quader enthalten identische Gitterausschnitte der Dimension $l_{11} \times l_{22} \times l_{33}$. Der dritte Randvektor $\mathbf{L}_3$ besitzt nur eine z-Komponente und fällt mit einer Kante der Quader zusammen. Der zweite Randvektor $\mathbf{L}_2$ liegt in der yz-Ebene und gibt die Höhe und den Versatz der Quaderreihen in z-Richtung an. Der erste Randvektor beschreibt die Dicke der Quader und den Versatz der nächsten Quaderschicht in y- und z-Richtung an.

Berücksichtigt man zu der utlf-Form 2.6 und Gleichung 2.4 noch die 24 Punktsymmetrien T_i des kubischen Gitters, lassen sich alle geometrisch verschiedenen Gitterausschnitte generieren. Bei den Punktsymmetrien T_i handelt es sich um die zwei-, drei- und vierzähligen Drehachsen des kubischen Gitters und Kombinationen davon. Zwei Matrizen L und L' bezeichnen geometrisch gleiche Gitterausschnitte, wenn

$$L' T_i L^{-1} = U \quad \mathrm{Det}(T_i) = 1 \tag{2.7}$$

gilt, wobei U wieder eine beliebige ganzzahlige Matrix darstellt. Dann stellen die Vektoren aus L' Linearkombinationen der gegebenenfalls gedrehten Vektoren aus L dar, bilden also das gleiche Gerüst von Eckpunkten.

Tabelle 2.1 gibt einen Überblick über die Anzahl der auf diese Weise generierten Gitterzellen. Die Gesamtzahl der Plätze ist dabei auf 32 beschränkt, da die Energien größerer Gitterzellen nur mit sehr hohem Aufwand oder gar nicht berechnet werden können. Da die Anzahl der

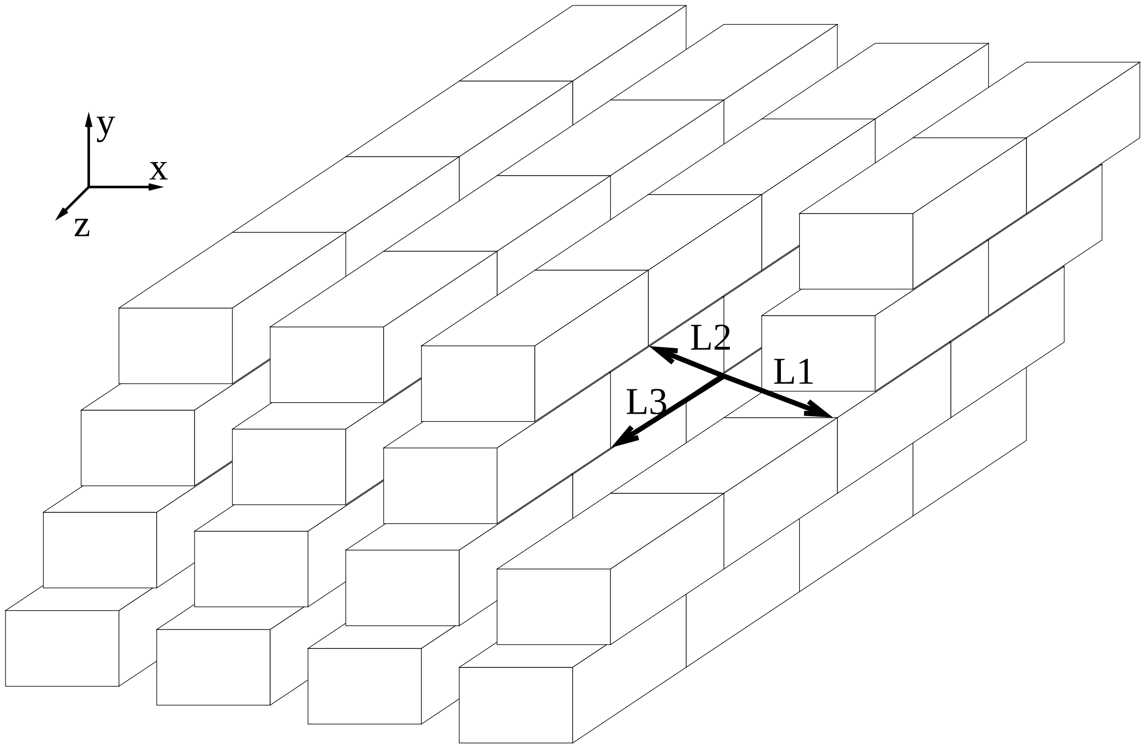


Abbildung 2.2: Darstellung der utlf-Bezeichnung. Zunächst werden Quader der Größe $l_{11} \times l_{22} \times l_{33}$ in z-Richtung gestapelt. Die nächste Schicht wird um l_{23} in z-Richtung versetzt gestapelt. Die so gebildeten Schichten werden dann um l_{12} in y-Richtung und um l_{13} in z-Richtung aneinandergelegt. So erhält man eine dichte Packung von Quadern, deren Ecken um Vielfache der Eckvektoren $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$ und $\mathbf{L}_3$ verschoben sind.

generierbaren Gitterzellen mit N stark wächst, wurden zusätzliche Kriterien herangezogen, die eine gewisse qualitative Vorauswahl der Gitterzellen ermöglichen. Die Kriterien sind so gewählt, daß Gitterzellen mit starken Randeffekten unberücksichtigt bleiben.

Folgende Bedingungen werden zusätzlich an die Gitterzellen gestellt:

- Jeder Gitterplatz sollte 8 verschiedene Nachbarn besitzen, um die Nachbarschaftsverhältnisse des BCC-Gitters korrekt wiederzugeben.

- Da das BCC-Gitter bipartit ist, d.h. in zwei Untergitter A und B zerfällt, und damit den antiferromagnetischen Grundzustand ermöglicht, müssen auch die Randvektoren $\mathbf{L}_i$ so gewählt werden, daß die endliche Gitterzelle ebenfalls bipartit ist. Im anderen Fall würde die Randbedingung Frustration bewirken.

Die kleinste so generierbare Gitterzelle hat 16 Plätze. Die in diesem Abschnitt beschriebenen Eigenschaften lassen sich gut in entsprechende Computerprogramme umsetzen, so daß die Tabelle der verschiedenen Gitterzellen automatisch erzeugt werden kann.

Tabelle 2.1: Anzahl endlicher Gitterzellen des BCC-Gitters mit gerader Teilchenzahl N, mit genau acht verschiedenen Nachbarplätzen und einem maximalen geometrischen Abstand von sechs. Die Spalten bedeuten: n_g - geometrisch verschiedene Gitterzellen; n_b - bipartite Gitterzellen; n_t - topologisch verschiedene Gitterzellen; n_u - statistisch "wertvolle" Gitterzellen (mit einem statistischen Gewicht $w > 0.85$, siehe Text).

N	n_g	n_b	n_t	n_u
16	12	5	1	1
18	15	1	1	1
20	22	4	2	2
22	16	1	1	1
24	52	15	6	5
26	21	2	2	2
28	44	9	6	4
30	52	7	7	5
32	57	20	16	10
Total:	291	64	42	31

2.3 Topologisch verschiedene endliche Gitterzellen

Die oben generierten geometrisch verschiedenen Gitterzellen können in bestimmten Fällen völlig identische physikalische Ergebnisse liefern. Das ist der Fall, wenn diese Gitterzellen topologisch identisch sind. Topologisch identisch sind Gitterzellen, die unabhängig von den Raumkoordinaten dieselbe Topologie haben und damit den gleichen Hamiltonoperator 2.8 liefern. Das bedeutet, daß geschicktes Umnummerieren der Plätze der endlichen Gitterzelle X oder des dazugehörigen Hamiltonoperators H_x die Gitterzelle Y b.z.w. der entsprechende Operator H_y generiert wird. Anders ausgedrückt existiert eine Permutationsmatrix P, die zusammen mit den Nachbarschaftsmatrizen X und Y der beiden Gitterzellen die Gleichung $XP = PY$ erfüllt. Beide Gitterzellen sind deshalb topologisch gleich. Die Nachbarschaftsmatrix ist dabei eine $N \times N$-Matrix M, deren Elemente m_{ij} den Bindungen zwischen dem Platz mit der Zeilennummer i und dem Platz mit der Spaltennummer j entsprechen. Diese Elemente sind Null, wenn Platz i und Platz j keine Nachbarn sind, oder $m_{ij} = 1$, wenn i und j nächste Nachbarn sind.

Das Feststellen, ob zwei endliche Gitterzellen topologisch identisch sind, ist ein nichttriviales Problem. Es ist äquivalent zu einem Problem aus der Graphentheorie in der Mathematik zur Isomorphie von Graphen (GIP = graph isomorphism problem). Dabei entsprechen die Plätze der Gitterzelle den Knoten und die Wechselwirkungen zwischen den Plätzen den Kanten des Graphen. Bisher existiert kein polynomialer Algorithmus, um dieses Problem zu lösen. Ein sehr effizientes Programmpaket namens "nauty" [37] ist jedoch in der Lage, die Isomorphie der hier auftretenden Graphen sehr schnell zu prüfen.

Viel leichter läßt sich feststellen, ob zwei Gitterzellen topologisch verschieden sind. Verschiedene Möglichkeiten dafür sind in [38] beschrieben. Die Anzahl topologisch verschiedener Gitterzellen ist in Tabelle 2.1 Spalte n_t aufgeführt. Die topologisch verschiedenen Gitterzellen mit

$N = 16 \ldots 32$ Plätzen sind in Tabelle F.1 aufgeführt. Neben den utlf-Vektoren sind auch die "mcf"-Vektoren (mcf = most compact form) angegeben. Die mcf-Vektoren spannen die gleiche Gitterzelle auf, sind jedoch so kurz (kompakt) wie möglich gewählt. Der Quotient aus den Längen des kürzesten und des längsten mcf-Vektors gibt Auskunft, wie stark der die Gitterzelle umspannende Parallelepiped verzerrt ist.

2.4 Der HAFM auf endlichen BCC-Gitterzellen

Für die nach der oben beschriebenen Prozedur gefundenen endlichen Zellen des BCC-Gitters mit periodischen Randbedingungen sollen nun der Grundzustand und die tiefliegenden Anregungen für das Spin-1/2-Heisenbergmodell

$$H = J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \tag{2.8}$$

berechnet werden. Summiert wird dabei nur über nächste Nachbarn $< i, j >$. Im Falle des BCC-Gitters sind das acht Nachbarn für jeden Platz eines Untergitters. Der Grundzustand für ein bipartites antiferromagnetisches Gitter muß nach Lieb und Mattis [16] den Gesamtspin $S = 0$ haben und ist nicht entartet. Später wurde von Kennedy, Lieb und Shastry [39] gezeigt, daß der Grundzustand des HAFM auf dem kubischen Gitter langreichweitige Ordnung besitzt. Da das BCC-Gitter wie das Quadratgitter bipartit und unfrustriert ist, jedoch mehr Nachbarn (8) als das kubische Gitter (6) besitzt, sollte es ebenfalls geordnet sein.

Für die endlichen Gitterzellen wurden mit Hilfe der exakten Diagonalisierung die tiefste Energie und dessen Eigenzustand bestimmt. Zur Diagonalisierung wurde das Lanczos-Verfahren [40] verwendet. Da die Rechenzeit und der Speicherbedarf von der Größe des Hilbertraumes abhängt, mußten die S^z-Symmetrie, Translationssymmetrien und Punktgruppensymmetrien herangezogen werden, um den Hilbertraum auf möglichst kleine Größe zu reduzieren. Damit hatte die größte zu diagonalisierende Matrix für $N = 32$ Plätze eine Ordnung von etwa 4.7×10^6. Die Genauigkeit der mit dieser Methode bestimmten Energien ist durch die Rechengenauigkeit der Computer begrenzt und liegt hier bei 7 bis 8 Ziffern.

Aus den Eigenzuständen wurden für alle Gitterzellen die Spin-Spin-Korrelationen sowie die Magnetisierung (Formel 2.18) berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle F.3 und F.4 dargestellt.

2.5 Abschätzung der Eigenschaften des BCC-Gitters

Um Aussagen über den thermodynamischen Limes $N = \infty$ bei T=0 machen zu können, müssen die Daten der endlichen Gitterzellen extrapoliert werden. Dazu wird eine polynomiale Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 von der inversen Ausdehnung L^{-1} der Gitterzellen vorausgesetzt. Die Gitterausdehnung ist für hyperkubische Gitter als $L^D = N$ definiert. In diesem Abschnitt wird die Ausdehnung L mittels $2L^3 = N$ definiert. Dies geschieht in Anlehnung an [34], wo die kubisch gewählte Elementarzelle zwei Gitterplätze enthält. In [38] wird dagegen die primitive Elementarzelle mit $L^3 = N$ verwendet. Die Wahl der Definition von L ändert nichts wesentliches an der Extrapolation. Nur bei der Bestimmung der Parameter v, ρ_s und $\chi_\perp$ müssen die Konstanten β und γ entsprechend [38] modifiziert werden.

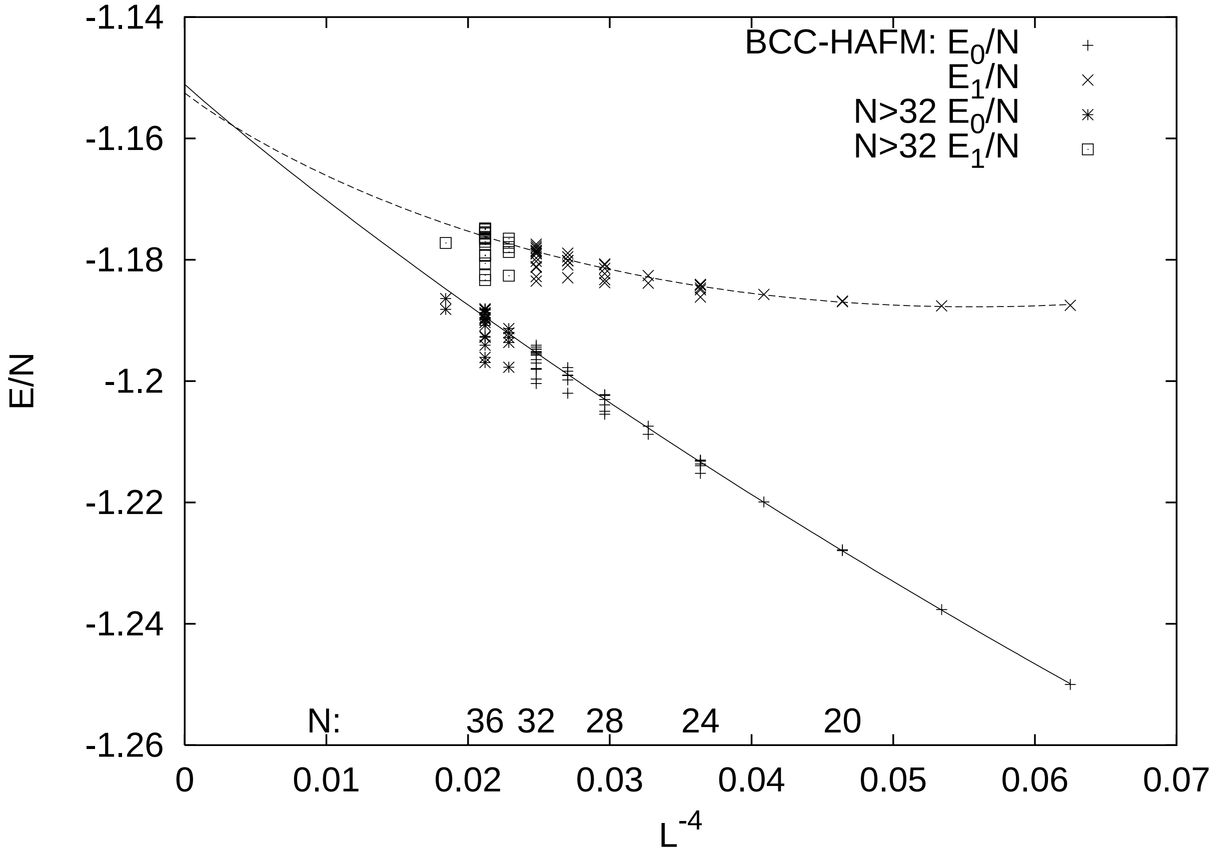


Abbildung 2.3: Finite-Size-Skalierung der Grundzustandsenergien E_0/N und niedrigster Anregungsenergie E_1/N des Heisenbergmodelles auf endlichen BCC Gitterzellen. Für den Fit wurden nur Gitterzellen für $16 \leq N \leq 32$ verwendet. Zusätzlich sind Energien für einige $N > 32$ Gitterzellen dargestellt (siehe Text).

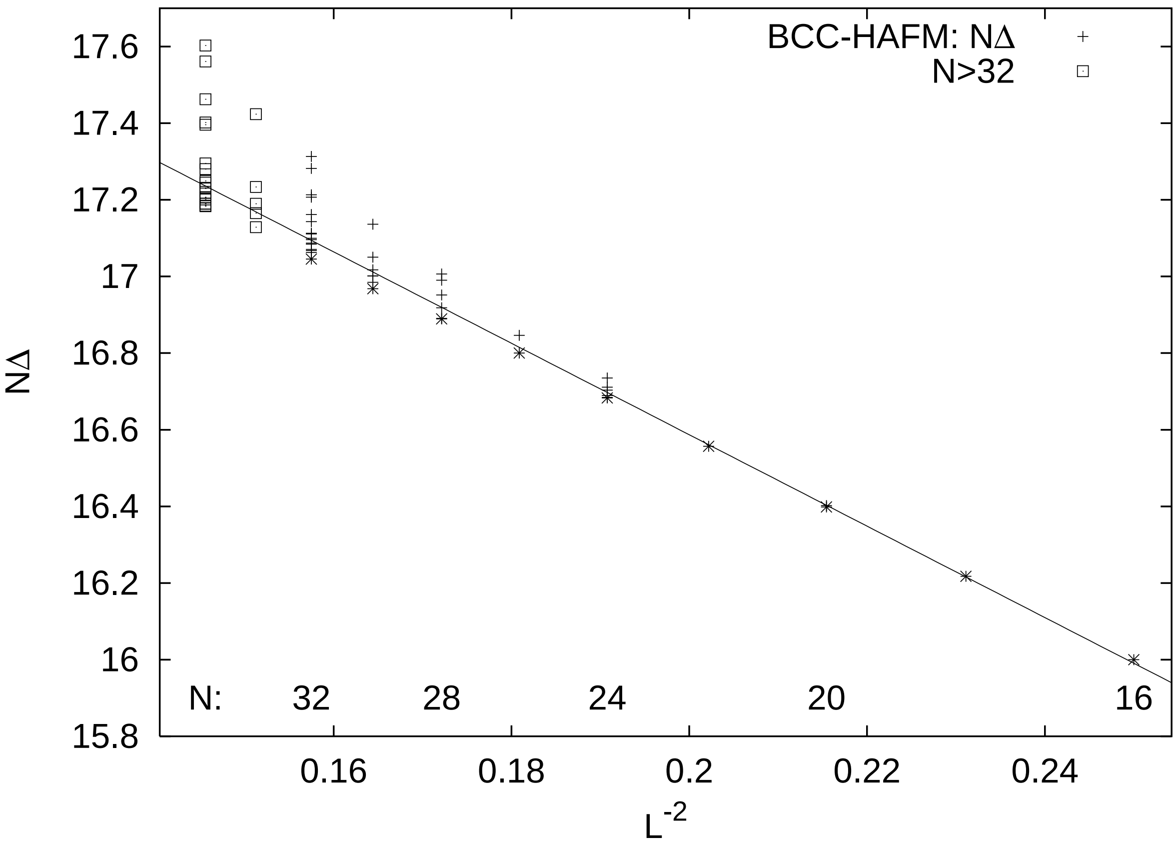


Abbildung 2.4: Finite-Size-Skalierung der mit N multiplizierten Triplett-Energielücke $N\Delta_1 = N(E_1 - E_0)$. Dabei ist bei fester Systemgröße L die Energielücke am kleinsten, wenn die Energie E_0 beziehungsweise E_1 am größten ist.

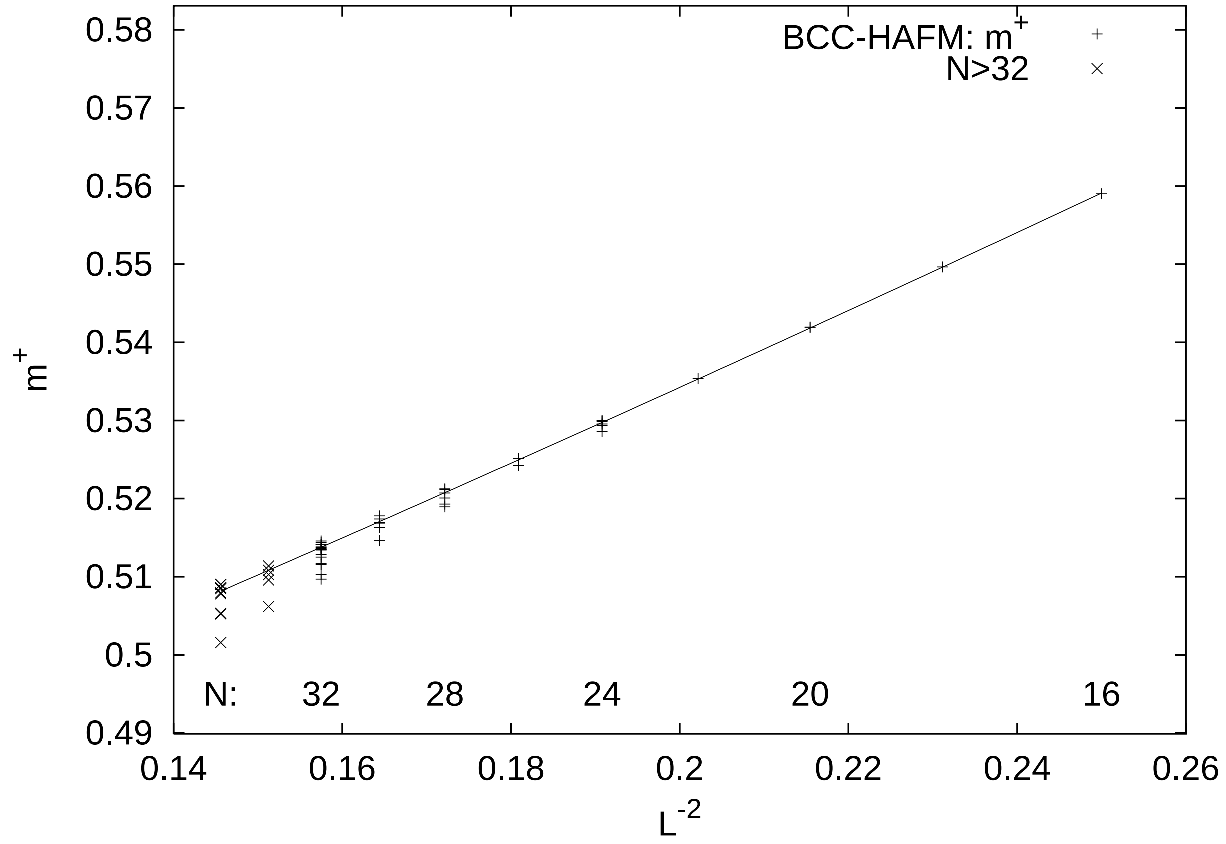


Abbildung 2.5: Extrapolation der Magnetisierung $m^+(N)$ endlicher Gitterzellen $16 \leq N \leq 32$ zum thermodynamischen Limes m^+.

Die Annahme, daß die Energie E polynomial von L^{-1} abhängt, wird durch das Finite-Size-Verhalten [34] in der Spinwellentheorie bestätigt und entspricht früheren Untersuchungen zum Finite-Size-Verhalten effektiver Modelle [41, 42, 43]. Grundlage dieser Untersuchungen ist die Annahme, daß das Finite-Size-Verhalten durch masselose Magnonanregungen dominiert wird. Die Abhängigkeit für die Grundzustandsenergie $\epsilon_0 = E_0/N$ lautet dann

$$\epsilon_0(L) = A_0^0 + A_4^0 L^{-4} + A_6^0 L^{-6} + \dots \quad , \tag{2.9}$$

wobei $A_0^0 = \epsilon_0(\infty)$ der gesuchten Energie im thermodynamischen Limes entspricht.

Nach [44] ist

$$A_{D+1}^0 = -\frac{(\mathcal{N}-1)}{2}\beta v, \qquad A_{2D}^0 = \frac{(\mathcal{N}-1)(\mathcal{N}-2)v^2}{8\rho_s} \tag{2.10}$$

mit der Dimension D, dem Spinfreiheitsgrad $O(\mathcal{N})$, der Spinwellengeschwindigkeit v, der Spinsteifigkeit ρ_s [3] und der Strukturkonstante β. Für das Heisenbergmodell auf dem BCC-Gitter mit $D = 3$, $\mathcal{N} = 3$ und $\beta = \beta_{BCC} = \beta_{SC}/2 = 0.837537$ sind die Koeffizienten als

$$A_4^0 = -\beta v, \qquad A_6^0 = \frac{v^2}{4\rho_s} \tag{2.11}$$

bestimmt.

Abbildung 2.3 zeigt die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie $\epsilon_0(L)$ von der Systemgröße. Neben den Energien für Systeme bis zu $N = 32$ Plätzen sind auch die Energien für einige größere Systeme berechnet worden. Wegen der notwendigen längeren Rechenzeiten konnten jedoch nicht alle möglichen Gitterzellen für $N > 32$ berechnet werden. Die wenigen schon berechneten größeren Systeme wurden jedoch schon in die Diagramme aufgenommen, um einen Einblick in den weiteren Verlauf der Größen zu geben. Spätere Rechnungen könnten das Bild vervollständigen.

Ebenfalls dargestellt ist die niedrigste Anregung $\epsilon_1(L)$ der entsprechenden Systeme. Diese muß bei Systemen ohne magnetische Anregungslücke (gap) gegen den gleichen Grenzwert $\epsilon_0(\infty) = \epsilon_1(\infty)$ konvergieren. Die Abweichung dieser Werte voneinander liefert somit die Größenordnung des Fehlers bei der Extrapolation.

Abbildung 2.4 zeigt die Differenz der Energien $\Delta_1(L) = E_1(L) - E_0(L)$ in Abhängigkeit von der Systemgröße. Deren Abhängigkeit wird durch folgendes Polynom

$$N\Delta_1(L) = D_6 + D_7 L^{-1} + D_8 L^{-2} + \dots \quad , \tag{2.12}$$

beschrieben [44]. Nach Verallgemeinerung der in [44] für $D = 2$ beschriebenen Abhängigkeit ist der führende Koeffizient

$$D_{2D} = \frac{j(j+\mathcal{N}-2)v^2}{2\rho_s} \tag{2.13}$$

Mit der Spinquantenzahl der Anregung $j = 1$ und $\mathcal{N} = 3$ erhält man somit

$$D_6 = \frac{v^2}{\rho_s} = \frac{1}{\chi_\perp}, \tag{2.14}$$

[3] Die Spinsteifigkeit (spin stiffness) ρ_s mißt die Energieänderung wenn benachbarte Spins um den Winkel Θ gegeneinander verdreht werden. Sie ist somit definiert als $\rho_s = d^2\epsilon_0(\Theta)/d\Theta^2\big|_{\Theta=0}$. Ein positiver Wert ρ_s bedeutet, daß eine magnetische Fernordnung existiert, während $\rho_s = 0$ auf einen magnetisch ungeordneten Zustand hinweist.

wobei die hydrodynamische Gleichung [32] $\rho_s = \chi_\perp v^2$ berücksichtigt wurde.

Die verschwindenden Koeffizienten $D_0 \ldots D_5$ ermöglichen die Extrapolation von $\epsilon_1 = \epsilon_0 + \Delta_1/N$

$$\epsilon_1(L) = A_0^1 + A_4^1 L^{-4} + A_6^1 L^{-6} + \ldots \quad , \tag{2.15}$$

analog zu $\epsilon_0(L)$. Die Parameter D_7 und D_8 lassen sich wegen der Streuung der Daten nicht besonders gut abschätzen. Hier wird in Übereinstimmung mit Spinwellenrechnungen an dreidimensionalen Gittern [34] $D_7 = 0$ gewählt.

Diese Wahl wird gestützt durch die Tatsache, daß die Extrapolation mit D_6 und D_8 eine Abweichung liefert, die eine Zehnerpotenz geringer ist, als die Extrapolation mit D_6 und D_7, wenn man nur diejenigen Gitterzellen mit der maximalen Energie bei fester Systemgröße N berücksichtigt [4]. Für den Wert und der Genauigkeit der hier abgeschätzten Größen ist diese Wahl jedoch weniger wichtig.

Da die Energie ϵ_0 dem Vierfachen der mittleren Korrelation nächster Nachbarn $4\Gamma_1$ entspricht, können auch die Korrelationen über zweite und drittnächste Nachbarn durch das Polynom 2.9 extrapoliert werden.

Die Untergittermagnetisierung des Grundzustandes zeigt Abbildung 2.5. Da die Untergittermagnetisierung $\mathbf{M}^+$

$$\mathbf{M}^+ \equiv \sum_{i=1}^{N/2} \mathbf{S}_i - \sum_{j=1}^{N/2} \mathbf{S_j} \tag{2.16}$$

für endliche HAFM ohne externes Magnetfeld verschwindet, wird hier generell die nichtverschwindende Quadratuntergittermagnetisierung

$$\left\langle (\mathbf{M}^+)^2 \right\rangle = \sum_{i,j=1}^{N} |\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle| \tag{2.17}$$

verwendet, die im folgenden einfacher als Magnetisierung oder Untergittermagnetisierung bezeichnet werden soll (siehe auch Anhang A). Die Magnetisierung pro Spin m^+ ist dann

$$m^+ = \left[\left\langle (\mathbf{M}^+)^2 \right\rangle \right]^{1/2} / N. \tag{2.18}$$

Die niedrigsten Ordnungen der Untergittermagnetisierung

$$m^+(L) = B_0 + B_2 L^{-2} + \ldots \quad . \tag{2.19}$$

lassen sich ebenfalls durch die Parameter der effektiven Theorie beschreiben. So ist

$$B_2 = \Sigma v \gamma / \rho_s \tag{2.20}$$

[4] Gitterzellen mit größerer Imperfektion haben wegen der periodischen Randbedingungen kürzere Perioden als Gitterzellen mit kleinerer Imperfektion. Damit treten in Richtung kürzerer Perioden auch stärkere Korrelationen auf, die mit den anderen Korrelationen summiert niedere Energien liefern. Dieses Bild ist deutlicher beim quadratischen Gitter zu beobachten, welches wegen der geringeren Dimension weniger Möglichkeiten hat, verschiedene Gitterausschnitte zu definieren.

mit $\Sigma = m_\infty^+ = B_0$, der Spinwellengeschwindigkeit v, der Spinsteifigkeit ρ_s und dem Strukturfaktor $\gamma = \gamma_{BCC} = \gamma_{SC}/2 = 0.11289245$ bestimmt. Statistische Analysen in [38] legen die Verwendung einer zusätzlichen Ordnung $B_4 L^{-4}$ nahe.

Gewöhnliche Quadratmittelaproximation für $\epsilon_0(L)$ liefert

$$A_0^0 = -1.1552(42), \qquad A_4^0 = -1.88(35), \qquad A_6^0 = 1.5(12)$$

für die Koeffizienten. In den Klammern sind die Standardfehler angegeben[5]. In [38] verfeinerten wir die Approximation durch Wichten der Abweichungen mittels Tukey's biweight[47]-Funktion. Diese Approximation kann durch wiederholtes Anwenden verbessert werden. Dadurch verringert sich der statistische Fehler und man erhält ein Kriterium für die Qualität der einzelnen Gitterzellen, das man zur Definition von sogenannten „Ausreißern“ heranziehen kann. In dieser Arbeit halte ich mich an $w_c = 0.85$ als kritisches Gewicht, unterhalb dessen der Wert als Ausreißer definiert wird. Die so erhaltenen Approximationen ändern sich nur geringfügig, wenn w_c variiert wird. Mit dieser Methode erhält man nun für die Koeffizienten

$$A_0^0 = -1.1511(16), \qquad A_4^0 = -2.13(13), \qquad A_6^0 = 2.18(42).$$

Die dabei erhaltenen Gewichte w_1 sind Tabelle F.4 aufgeführt.

Für die Korrelationen zu übernächsten und drittnächsten Nachbarn ergeben sich $\Gamma_2 = 0.2161(6)$ und $\Gamma_3 = -0.214(3)$, wenn diese wie die Energie skaliert werden.

Über Formel 2.11 lassen sich nun die Spinwellengeschwindigkeit v bestimmen

$$v = -A_4^0/\beta = 2.54(16) \quad .$$

Außerdem ermöglicht Formel 2.11 prinzipiell auch die Bestimmung von ρ_s und über die hydrodynamische Gleichung $\rho_s = \chi_\perp v^2$ die Berechnung der Suszeptibilität $\chi_\perp$

$$\rho_s = v^2/(4A_6^0) = 0.74(24),$$

jedoch ist der Fehler für ρ_s sehr groß, so daß die Bestimmung aller mikroskopischer Größen allein aus der Energieskalierung als wenig sinnvoll erscheint.

Ein weitere Möglichkeit zur Abschätzung der Genauigkeit bietet die Approximation von E_1/N zu

$$A_0^1 = -1.1525(15), \qquad A_4^1 = -1.90(12), \qquad A_6^1 = 5.36(41)$$

mit guter Übereinstimmung von A_0^1 und A_0^0 und ca. 10% Abweichung von A_4.

Die Triplettanregung läßt sich durch die Konstanten

$$D_6 = 18.97(3), \qquad D_8 = -11.93(13)$$

annähern. Die Suszeptibilität läßt sich damit zu

$$\chi_\perp = 1/D_6 = 0.0529(16)$$

[5] Der Fehler für die letzten Ziffern wird dahinter in Klammern gesetzt, so daß -1.1552(42) als -1.1552±0.0042 zu lesen ist.

Tabelle 2.2: Abschätzung (mit Vertrauensbereich) der T = 0 Eigenschaften des S = 1/2 Heisenberg AFM auf dem BCC-Gitter

Methode	$-\epsilon_0$	$-A_4$	A_6	m^+	B_2	B_4
endl.Gitterzellen	1.1518(9)	2.13(13)	2.2(4)	0.4409(11)	0.42(3)	0.17(9)
Spinwellen [34]	1.1512(1)	1.8	—	0.4412(3)	0.45	—
Reihenentw. [34]	1.1510(5)	—	—	0.442(4)	—	—
Olès [46]	1.160	—	—	0.426	—	—

abschätzen. Durch Regression der Magnetisierung erhält man die Konstanten

$$B_0 = 0.4434(31), \qquad B_2 = 0.419(33), \qquad B_4 = 0.17(09).$$

Mit Hilfe von $m^+_\infty = \Sigma = B_0 = 0.4434(31)$, $\gamma = 0.11289245$, B_2 und dem weiter oben bestimmten $v = 2.54(16)$ läßt sich ρ_s zu

$$\rho_s = \Sigma v \gamma / B_2 = 0.303(45)$$

bestimmen. Der so erhaltene Wert für die Spinsteifigkeit ρ_s ist deutlich größer als der Spinwellenwert $\rho_s = 0.239$ [34], erfüllt jedoch zusammen mit den anderen unabhängig bestimmten Parametern die hydrodynamische Gleichung und hat einen deutlich geringeren statistischen Fehler, als der allein aus Gleichung 2.11 ermittelte Wert. Alle Größen sind mit der Spinwellengeschwindigkeit verknüpft, die ebenfalls größer als das Spinwellenresultat ist. Extrapolation der ersten Anregung $\epsilon_1(L)$ liefert für $A_4^1 = 1.90(12)$. Da die ersten Koeffizienten für $\epsilon_j(L)$ jedoch gleich sein sollten, ist diese Differenz ein Hinweis für eine zu hohe aus der Extrapolation bestimmten Spinwellengeschwindigkeit.

2.6 Zusammenfassung und Ausblick

In den vorhergehenden Abschnitten wurde gezeigt, daß trotz der beschränkten Möglichkeiten ($N \leq 32$) bei der exakten Diagonalisierung wesentliche Parameter des makroskopischen Systems bestimmt werden können. Das gelingt durch zum Teil ausgefeilte statistische Auswertungen.

Die erhaltenen Werte stimmen gut mit anderen Arbeiten überein. In Tabelle 2.2 sind zum Vergleich die Ergebnisse der Extrapolationen dreier anderer Arbeiten aufgeführt.

Die erzielten Ergebnisse für die Grundzustandsenergie weichen nur 0.05% von den Ergebnissen aus dritter Ordnung Spinwellentheorie und Reihenentwicklung ab. Auch die Magnetisierung stimmt mit ca. 0.2% Abweichung mit diesen zwei Arbeiten überein.

Entsprechend Arbeit [34] können über die Skalierungsfaktoren auch die Spinwellengeschwindigkeit $v = 2.54(16)$, die Spinsteifigkeit $\rho_s = 0.303(45)$ und die Suszeptibilität $\chi_\perp = 0.053(2)$ berechnet werden. Dabei sind die geometrischen Eigenschaften des BCC-Gitters in den Faktoren $\beta = 0.837537$ und $\gamma = 0.11289245$ enthalten [43]. Im Vergleich dazu liefert die Spinwellentheorie dritter Ordnung eine Spinwellengeschwindigkeit von $v = 2.152$.

Die aus den Approximationen erhaltenen Größen sind noch mit relativ großen Fehlern behaftet. Die Genauigkeit der Approximation läßt sich in Zukunft jedoch weiter erhöhen, indem das Heisenbergmodell auf größeren Gitterausschnitten berechnet wird. Gitterzellen bis $N = 40$ lassen sich mit derzeitig verfügbarer Rechentechnik bereits heute berechnen, erfordern jedoch gut angepaßte Programme, um die Berechnungsdauer in Grenzen zu halten. Insbesondere auf die Parallelisierung der Algorithmen muß in Zukunft größerer Wert gelegt werden. Gleichzeitig sollte der Algorithmus an Systeme mit verteiltem statt gemeinsamen (shared) Speicher angepaßt werden. Diese Systeme sind leichter skalierbar und preiswerter, so daß Hochleistungsrechner der Zukunft wahrscheinlich eher mit verteiltem Speicher ausgerüstet sind.

Mit zunehmender Gittergröße nimmt auch die Anzahl der Gitterzellen (Tabelle 2.1) zu. Wünschenswert wäre daher eine bessere Vorauswahl "wertvoller" Gitterzellen. Die von uns [38] benutzte geometrische Imperfektion I_g zur Klassifizierung schiefer Gitterzellen ist eine intuitive Größe. Betrachtet man die Energien verschiedener Gitterzellen genauer, so scheint es eine sehr glatte obere Grenze für die Energie endlicher Gitterzellen zu geben, während die Untergrenze kein solches Verhalten zeigt. Gitterzellen mit schlechten geometrischen Eigenschaften haben eine höhere Imperfektion I_g und meist auch eine geringere Energie. Auch die Streuung der Energien wird nach unten hin größer. Das ist auch der Grund, warum die gewichtete Extrapolation durch den oberen Bereich der Punktwolken verläuft. Damit scheint die Energie selber ebenfalls ein Kriterium für die Qualität der Gitterzellen zu sein. Sollte diese Vermutung richtig sein, kann man die lang dauernde Berechnung einer großen Anzahl von Gitterzellen auf eine sehr kleine Untermenge reduzieren. Die Größe der Energielücke und der Magnetisierung ist streng abhängig von der Energie einzelner Gitterzellen mit gleicher Teilchenzahl N. So liefern Gitterzellen mit maximaler Energie die kleinste Anregungslücke und die größte Magnetisierung. Zumindest Vergleiche mit dem Quadratgitter und erste Rechnungen mit $N > 32$ bestätigen diese Annahme.

Da die hier bestimmten mikroskopischen Parameter fundamental für das Verhalten von magnetischen Systemen bei niedrigen Temperaturen sind, wäre eine möglichst genaue Bestimmung der Werte wünschenswert. Die Spinsteifigkeit ρ_s weist mit über 10% Fehler die größte Ungenauigkeit auf. Diese wird verursacht durch deren indirekte Bestimmung über Gleichung 2.14. Ein anderer Weg wäre die direkte Bestimmung von $\rho_s(N)$ für endliche Gitterzellen und anschließender Extrapolation. Einarsson und Schulz [48] demonstrierten diese Methode am HAFM auf dem Quadratgitter und erreichten eine hohe Genauigkeit, wobei der Fehler für die Spinsteifigkeit kleiner 2% war. Dabei können die Symmetrien des Hamiltonoperators weiterhin genutzt werden und die Größe des Hilbertraum verdoppelt sich.

Die hier vorgenommenen Berechnungen zeigen, daß auch sehr kleine Gitterzellausdehnungen zu guten Ergebnissen bei der Extrapolation führen. Dieses Ergebnis erhöht das Vertrauen für den Fall von ein- und zweidimensionalen Systemen, da bei gleicher Teilchenzahl größere Systemausdehnungen simuliert werden.

2.7 Der XY-Ferromagnet auf dem BCC-Gitter

Wie im vorigen Abschnitt zum Heisenberg-Antiferromagneten beschrieben, lassen sich auch beim XY-Ferromagneten

$$H = J \sum_{<i,j>} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \quad \text{mit} \quad J = -1 \tag{2.21}$$

Tabelle 2.3: Anzahl der verschiedenen ungeraden/geraden BCC-Gitterzellen und der schließlich nutzbaren Gitterzellen mit $9 \leq \mathrm{N} \leq 32$ Plätzen. n ist die Anzahl geometrisch verschiedener Gitterzellen, $\mathrm{n_b}$ ist die Anzahl der bipartiten Gitterzellen und ν ist die Zahl der zur Extrapolation genutzten Gitterzellen mit jeweils N Spins.

N	n	$\mathrm{n_b}$	ν
9/10	1/ 1	0	1/ 1
11/12	1/ 2	0	1/ 2
13/14	2/ 3	0	2/ 3
15/16	7/ 6	1	7/ 6
17/18	5/13	1	4/12
19/20	7/18	2	6/16
21/22	17/15	1	16/13
23/24	12/42	6	11/36
25/26	20/25	2	14/19
Subtotals	72/125	13	62/108
27/28	36/45	5	25/32
29/30	22/67	7	16/44
31/32	26/69	15	17/50
Totals	156/306	40	120/234

mit Hilfe exakter Diagonalisierung und anschließender Finite-Size-Approximation die grundlegenden mikroskopischen Parameter (Spinwellengeschwindigkeit v, Spinsteifigkeit ρ_s und "staggered" Magnetisierung m^+) bestimmen [49]. Im Gegensatz zum Heisenbergmodell stehen jedoch eine Reihe weiterer Gitterzellen für die Approximation zur Verfügung, da nun auch nicht bipartite Gitterzellen und Gitterzellen mit ungerader Platzzahl N genutzt werden können. Damit steht eine viel größere Anzahl von Rohdaten für die Extrapolation zur Verfügung, was die Qualität der Extrapolation verbessern sollte.

Dabei zeigen sich geringe Abweichungen in den extrapolierten Energien zwischen gerader und ungerader Anzahl von Spins N als auch zwischen bipartiten und nichtbipartiten Gitterzellen (Bild 2.6-2.8). Im schlechtesten Fall weichen die extrapolierten Energien $\epsilon_0 = E_0/N = A_0$ um etwa 0.5% voneinander ab. Bild 2.8 zeigt ebenfalls, daß die Anregungsdifferenz $N\Delta(1/2, 3/2) = N(E_{3/2} - E_{1/2})$ sehr genau das doppelte der Differenz $N\Delta(0,1) = N(E_1 - E_0)$ mit $E_j = E(j = S^z)$ ist. Das spiegelt sehr genau die Tatsache wieder, daß die Energie $E(1/L)$ in sechster Ordnung in $1/L$ gleich $j^2 v^2/(2\rho_s)$ mit $j = S^z$ ist. Wie beim Heisenbergmodell lassen sich nun auch für das XY-Modell die mikroskopischen Parameter bestimmen. Für den thermodynamischen Grenzfall erhält man die Energie $\epsilon_0 = -1.0393(5)$ und die Magnetisierung $m_\perp = 0.478(1)$. Aus der Skalierung der Energie erhält man die Spinwellengeschwindigkeit $v = 2.16(2)$, Skalierung der Anregungslücke liefert $\chi_\perp = 0.1176(4)$ und die Skalierung der Magnetisierung liefert die Spinsteifigkeit $\rho_s = 0.64(10)$. Die so ermittelten Werte erfüllen die hydrodynamische Gleichung.

Beim XY-Modell steht zunächst eine deutlich größere Anzahl von Gitterzellen und damit von Datenpunkten für die Extrapolationen zur Verfügung. Jedoch zeigt sich deutlich, daß bipartite und nichtbipartite Gitterzellen verschieden skalieren. Dies ist nicht ungewöhnlich, da Ferromagnet

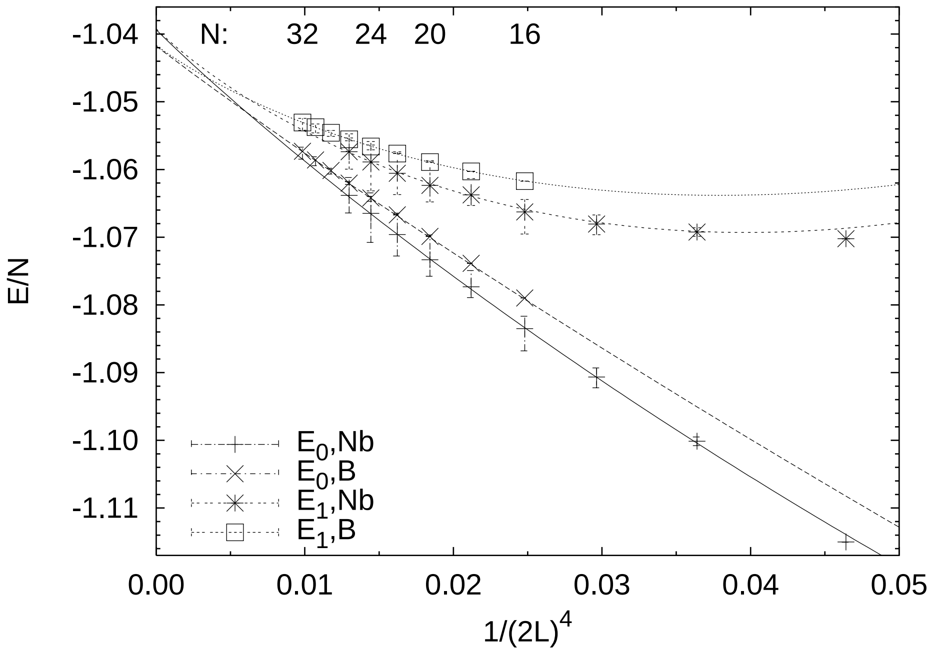


Abbildung 2.6: Energien von Grundzustand E_0 und erster Anregung E_1 auf endlichen geraden bipartiten (B) und nicht-bipartiten (Nb) Gitterzellen für den (s=1/2)-XY-Ferromagneten. Dargestellt sind die Mittelwerte und maximale sowie minimale Energien für entsprechende Gitterzellen der Größe N.

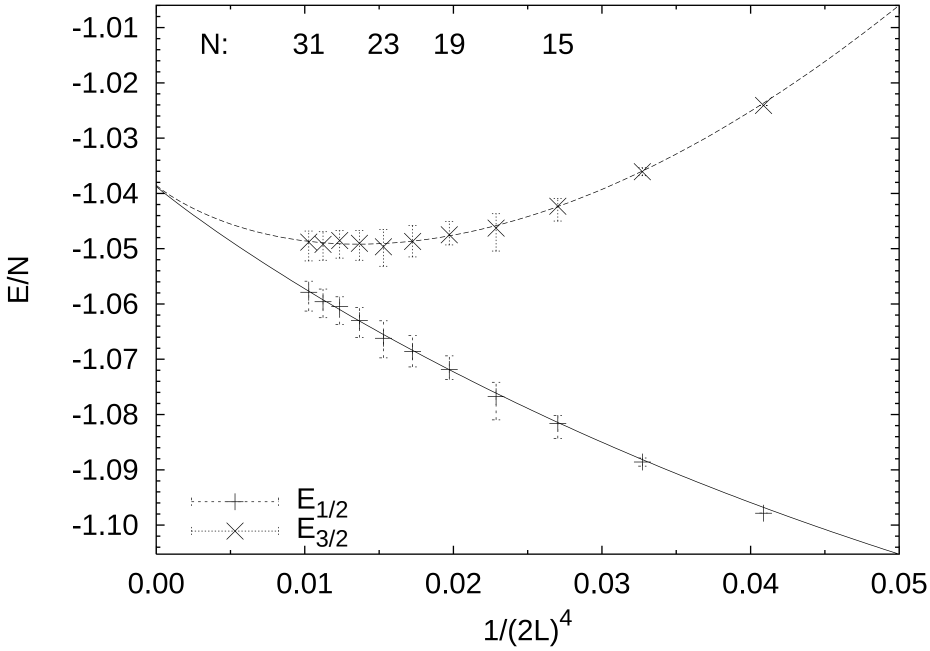


Abbildung 2.7: Energien von Grundzustand $E_{1/2}$ und erster Anregung $E_{3/2}$ auf endlichen ungeraden Gitterzellen für den (s=1/2)-XY-Ferromagneten. Dargestellt sind die Mittelwerte und maximale sowie minimale Energien für entsprechende Gitterzellen der Größe N.

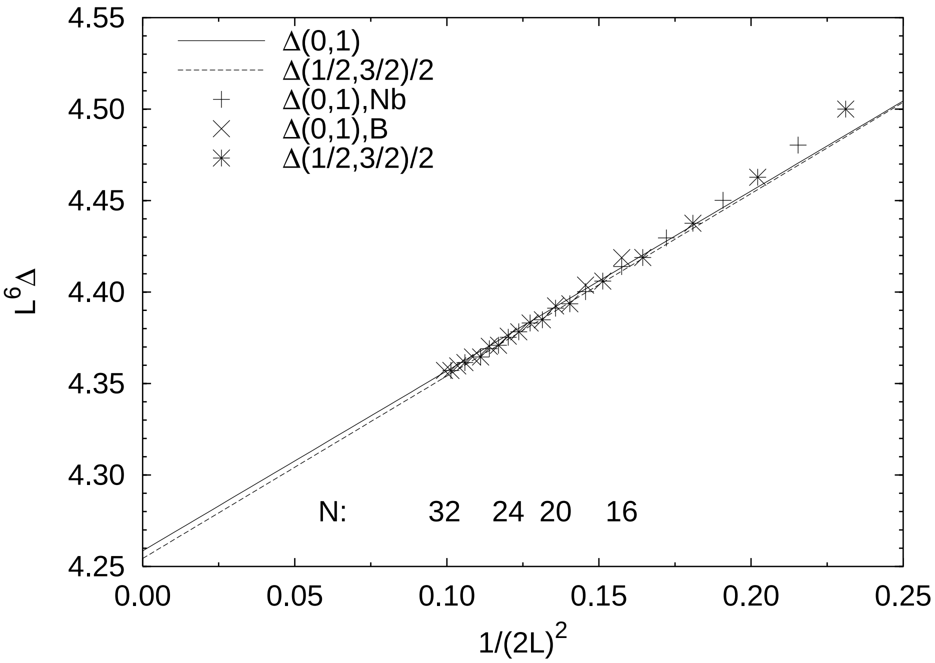


Abbildung 2.8: Energiedifferenz $\Delta(j,j+1) = E_{j+1} - E_j$ von Grundzustand E_j und erster Anregung E_{j+1} auf endlichen Gitterzellen für den (s=1/2)-XY-Ferromagneten. Für die ungeraden Gitterzellen ist $\Delta/2$ aufgetragen, um einen besseren Vergleich zu den geraden Gitterzellen zu haben (siehe Text). Dargestellt sind die Mittelwerte für entsprechende Gitterzellen der Größe N.

($J < 0$) und Antiferromagnet ($J > 0$) nur für bipartite Gitterzellen das gleiche Energiespektrum liefern und der klassische Grundzustand für den Antiferromagneten nur auf bipartiten Gitterzellen realisiert werden kann. Für nichtbipartite endliche Gitterzellen verschieben sich die Energien etwas in Richtung J. Die Extrapolation der bipartiten Gitterzellen liefert eine etwas andere Grundzustandsenergie als die Extrapolation von nichtbipartiten Gitterzellen und der Extrapolation von Gitterzellen mit ungerader Anzahl von Plätzen, wobei letztere sehr gut miteinander übereinstimmen. Die Extrapolation von Grundzustand und erster Anregung für diese drei Gitterzellentypen stimmen untereinander auch sehr gut überein. Ob die Abweichung der extrapolierten Energien der bipartiten Gitterzellen von den anderen nur an der geringeren Anzahl von Datenpunkten liegt oder andere Ursachen vorliegen, bedarf einer weiteren Analyse. Verbesserungen können in naher Zukunft unter anderem durch Rechnungen bis $N = 36$ oder durch Vergleich mit Näherungen (z.B. Spinwellentheorie) für endliche Gitterzellen erreicht werden.

Ähnlich wie beim Heisenberg-Antiferromagneten streuen die Energien nach unten stärker als nach oben. Am deutlichsten ist diese Eigenschaft bei den ungerader Teilchenzahl zu sehen. Sortiert man die bipartiten Gitterzellen für jedes N nach den Grundzustandsenergien, so erhält man für das XY-Modell die gleiche Reihenfolge, wie für das Heisenbergmodell. Dies ist ein Hinweis darauf, daß die Güte der Gitterzellen in Bezug auf die Extrapolation allein durch ihre Geometrie bestimmt wird.

Kapitel 3

Die frustrierte Dimer-Plaketten-Kette mit S=1/2 Spins

3.1 Einführung

Die frustrierte Dimer-Plaketten-Kette ist ein einfaches Beispiel für konkurrierende Gitter-Elemente. In diesem Fall konkurrieren Bindungen zwischen Dimeren und Bindungen auf Plaketten aus vier Spins miteinander, die abwechselnd in einer Kette angeordnet sind (siehe Formel 3.1 und zugehöriges Bild). Eine zusätzliche frustrierende Wechselwirkung zwischen zwei Spins einer Plakette J_f treibt einen Phasenübergang erster Ordnung [18].

Die ursprüngliche Motivation, ein eindimensionales Dimer-Plaketten-Modell zu untersuchen, stammt aus der aktuellen Diskussion um zweidimensionale Spinsysteme zusammen mit der Frage, ob diese langreichweitig geordnet sind. Damit eng zusammenhängend ist die Frage nach einer möglichen Anregungslücke (Spin-Gap). Eine solche magnetische Anregungslücke in einem zweidimensionalen s=1/2-Antiferromagneten wurde erstmalig bei CaV_4O_9 [124, 133] experimentell gefunden. Das Material besteht aus planaren Schichten von verketteten VO_5-Pyramiden, zwischen denen die magnetisch neutralen Kalziumatome (Ca) liegen. Da die V_2O_5-Schichten nur schwach miteinander gekoppelt sind, ist ein zweidimensionales Spinmodell eine gute Näherung für CaV_4O_9. Die V^{4+}-Ionen tragen jeweils magnetische Momente von $s = 1/2$ und wechselwirken durch den Superaustausch über Sauerstoff antiferromagnetisch. Die Struktur der Ebenen wird durch vier V^{4+}-Ionen gebildet, die plakettenförmig angeordnet sind. Die Plakettenecken wechselwirken paarweise mit den Nachbarplakettenecken. Diese Anordnung von Dimeren und Plaketten wird auch als „1/5-depleted lattice“oder CAVO-Modell bezeichnet und inspirierte die ersten Arbeiten zu dem eindimensionalen Analogon [17, 18]. Ein Gitter mit der gleichen Struktur wird auch in Kapitel 4.4.6 untersucht.

Eine andere experimentell untersuchte Substanz, die eine zweidimensionale Variante aus konkurrierenden Dimeren und Plaketten darstellt, ist $SrCu_2(BO_3)_2$ [19]. Hier tragen die in Ebenen liegenden Cu^{2+}-Ionen den Spin $s = 1/2$. Jeweils zwei dichter liegende Cu^{2+}-Ionen sind über O^{2-}-Ionen antiferromagnetisch gekoppelt und bilden Dimere (Dimer-Bindungen J), die wiederum über B^{3+}- und O^{2-}-Ionen an weitere, benachbarte, in der Ebene liegende, aber orthogonal angeordnete Dimere ankoppeln (Plaketten-Bindungen J'). Die Ebenen sind durch Sr^{2+}-Ionen

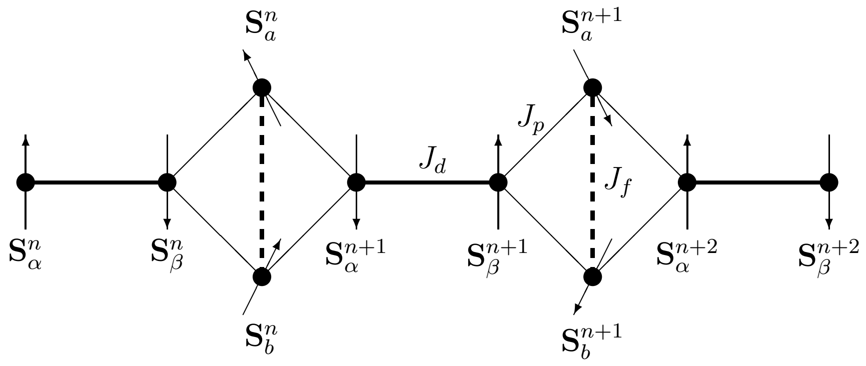


Abbildung 3.1: Ausschnitt aus der frustrierten Dimer-Plaketten-Kette. Die Spins $\mathbf{S}^n_{\alpha,\beta,a,b}$ (Punkte) wechselwirken über Spinaustauschkopplungen $J_{p,d,f}$ (Linien) mit ihren nächsten Nachbarn. Die Pfeile stellen einen Grundzustand für klassische Spins bei starker Frustration $J_f > J_p$ und antiferromagnetischer Kopplung $J_d > 0$ und $J_p > 0$ dar.

voneinander entkoppelt. Eine einfache Beschreibung für die Ebenen in $SrCu_2(BO_3)_2$ ist das Shastry-Sutherland-Modell [119] mit dem Parameter $J'/J = 0.7$. Dieser Parameterwert liegt nahe der Phasengrenze zwischen Dimer– und Néel–Phase. $SrCu_2(BO_3)_2$ hat eine magnetische Anregungslücke von etwa 20K und wird gut durch die Dimerphase des Shastry-Sutherland-Modelles beschrieben. Als weiteres charakteristisches Merkmal zeigt $SrCu_2(BO_3)_2$ Magnetisierungsplateaus bei 1/3, 1/4 und 1/8 des vollen Momentes [20]. Auch dieses Modell ähnelt mit seinen Plaketten und Dimeren sehr der hier zu untersuchenden Dimer-Plaketten-Kette im Spezialfall starker Frustration ($J_f = J_d$). Wie der letzte Abschnitt dieses Kapitels zeigt, findet sich diese Ähnlichkeit auch im Magnetisierungsverhalten wieder. In Kapitel 4.4.5 findet man weitere Untersuchungen zu einem zweidimensionalen Modell mit der gleichen Struktur.

Die eindimensionale Kette ist wesentlich einfacher als die zweidimensionalen Modelle, enthält jedoch nichttriviale Physik, was in den folgenden Abschnitten gezeigt werden soll.

Zunächst möchte ich die wichtigsten bereits in [17, 18] publizierten Resultate zusammenfassen. Diese beziehen sich im Wesentlichen auf Grundzustand und Anregungslücke für den antiferromagnetischen Fall. Diese werden hier durch die Erweiterung auf ferromagnetische Kopplungen vervollständigt. Es wird gezeigt, daß im Fall ferromagnetischer Kopplungen ein reichhaltigeres Phasendiagramm existiert.

Eine andere Erweiterung der in [17, 18] publizierten Resultate ist die Untersuchung der Abhängigkeit der Magnetisierung vom magnetischen Feld. Das Modell zeigt eine sehr ungewöhnliche Serie von Magnetisierungsplateaus, deren Entstehung im letzten Abschnitt dieses Kapitels beschrieben werden soll.

3.1.1 Das Modell

Der Hamiltonoperator hat die Form:

$$H_{d-p} = J_d \sum_{n=1}^{N_p} \mathbf{S}_\alpha^n \mathbf{S}_\beta^n + J_p \sum_{n=1}^{N_p} (\mathbf{S}_a^n + \mathbf{S}_b^n)(\mathbf{S}_\beta^n + \mathbf{S}_\alpha^{n+1}). \tag{3.1}$$

Tabelle 3.1: Charakteristische Korrelationen zwischen klassischen Spins der Länge $s = 1$ im Grundzustand ($T = 0$) des Dimer-Plaketten-Modelles mit schwacher $J_f < |J_p|$ und starker $J_f > |J_p|$ Frustration.

	$\langle \mathbf{S}_a^n \mathbf{S}_b^n \rangle$	$\langle \mathbf{S}_\alpha^n \mathbf{S}_\beta^n \rangle$	$\langle \mathbf{S}_\beta^n \mathbf{S}_a^n \rangle$
$J_f < \|J_p\|$	$+1$	$-J_d/\|J_d\|$	$-J_p/\|J_p\|$
$J_f > \|J_p\|$	$(2J_p^2/J_f^2 - 1)$	$-J_d/\|J_d\|$	$-J_p/\|J_f\|$

Dabei werden $\mathbf{S}_\alpha^n$ und $\mathbf{S}_\beta^n$ als Dimerspins, $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$ als Plakettenspins bezeichnet. $N_p = N/4$ ist die Anzahl der Plaketten bzw. die Länge der Kette in Einheitszellen. Zusätzlich wird ein frustrierender Term $J_f > 0$

$$H = H_{d-p} + H_f = H_{d-p} + J_f \sum_{n=1}^{N_p} \mathbf{S}_a^n \mathbf{S}_b^n \tag{3.2}$$

eingeführt. Wegen der Symmetrie des Hamiltonoperators ändert sich mit J_f nur die Energie $E = \langle H \rangle$ der Eigenzustände (siehe Kapitel 3.3). Die Eigenzustände selber ändern sich jedoch nicht.

3.2 Der klassische Grundzustand

Bei klassischen Spins und antiferromagnetischer Kopplung J_p und J_d stellt sich je nach Größe der Frustration einer von zwei Grundzuständen ein (siehe Tabelle 3.1). Bei schwacher Frustration $J_f < |J_p|$ sind alle Spins kolinear geordnet. Bei starker Frustration $J_f > |J_p|$ wird die Energie des Systems minimal, wenn sich oberer und unterer Spin ($\mathbf{S}_a$ und $\mathbf{S}_b$) einer Plakette um entgegengesetzte Winkel $\alpha = \arccos(|J_p|/J_f)$ verkippen (siehe Bild 3.1). Beide Phasen (kolineare und gekippte Phase) werden durch einen kontinuierlichen Phasenübergang bei $J_f = |J_p|$ getrennt.

Im Falle ferromagnetischer Kopplungen J_p oder J_d ändert sich nichts Wesentliches am klassischen Grundzustand. Für ferromagnetische Plakettenkopplung $J_p < 0$ sind die oberen und unteren Plakettenspins um π gedreht. Bei ferromagnetischer Dimerkopplung $J_d < 0$ müssen alle vier Spins jeder zweiten Plakette ($n+1$, $n+3$, $n+5$,...) um π gedreht werden. Damit ändern sich nur die Vorzeichen der entsprechenden Korrelationen in Tabelle 3.1.

3.3 Der Spin-1/2-Grundzustand

Tauscht man die Indizes vom oberen und unteren Plakettenspin $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$, so ändert sich der Hamiltonoperator nicht. Das Modell ist damit invariant gegen Spiegelung jeder einzelnen Plakette an der Kettenachse, und es lassen sich lokale Quantenzahlen S_{ab}^n der Operatoren $(\mathbf{S}_{ab}^n)^2$

$$[H, (\mathbf{S}_{ab}^n)^2]_- = 0 \quad , \quad \mathbf{S}_{ab}^n = \mathbf{S}_a^n + \mathbf{S}_b^n . \tag{3.3}$$

definieren. Ist die Quantenzahl $S_{ab}^n = 1$, so bilden die beiden Plakettenspins $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$ einen neuen Verbundspin der Länge[1] $s = 1$. Ist die Quantenzahl $S_{ab}^n = 0$, bilden die Plakettenspins $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$ ein Singulett, und die rechts und links vom Singulett liegenden Spins entkoppeln voneinander sowie von den Plakettenspins $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$. Die über die Plakette n reichenden Spin-Spin-Korrelationen sind somit Null (z.B. $\langle \mathbf{S}_\beta^n \mathbf{S}_\alpha^{n+1} \rangle = 0$). Ein sehr ähnliches Modell ist die Spinkette aus verbundenen Tetraedern [27, 28, 29], welches die magnetischen Eigenschaften von NaV_2O_5 beschreiben soll. Auch hier tragen lokale Singuletts und Tripletts wesentlich zu den physikalischen Eigenschaften bei.

3.3.1 Der unfrustrierte Fall $J_f = 0$

Ohne Frustration $J_f = 0$ ist der Grundzustand dadurch gekennzeichnet, daß alle Plakettenspinpaare ferromagnetisch korreliert sind ($\langle \mathbf{S}_a^n \mathbf{S}_b^n \rangle = 1/4$). Diese Tatsache ist damit verbunden, daß für $J_f = 0$ die Kette bipartit ist. Das heißt, die Spins lassen sich so in zwei Gruppen (Untergitter A und B) aufteilen, daß jeder Spin der einen Gruppe (Untergitter A) nur mit Spins der anderen Gruppe (Untergitter B) wechselwirkt. Für antiferromagnetische Modelle gilt dann das Lieb-Mattis-Theorem [16], und der Grundzustand hat den Gesamtspin $S = |S_A - S_B| = 0$ mit $S_{A(B)}$ als maximalen Spin des Untergitters $A(B)$. Außerdem sind alle Spins eines Untergitters (A oder B) ferromagnetisch korreliert und damit muß auch $\langle \mathbf{S}_a^n \mathbf{S}_b^n \rangle > 0$ für alle n gelten. Alle Quantenzahlen S_{ab}^n sind in diesem Falle gleich 1.

Die Spin-1/2-Spin-1-Kette

Im Fall $J_f = 0$ sind im Grundzustand die Quantenzahlen S_{ab}^n für alle $n = 1 \dots N_p$ gleich Eins und man kann die Spins $\mathbf{S}_a^n$ und $\mathbf{S}_b^n$ durch einen neuen Spin $\mathbf{S}_{ab}^n$ ersetzen. Man erhält damit eine Kette, deren Einheitszelle nur noch zwei 1/2-Spins und einen 1-Spin enthält. Alle Eigenzustände dieser neuen Kette sind auch Eigenzustände der Hamiltonoperatoren 3.1 und 3.2. Für $J_f = 0$ ist der Grundzustand der Spin-1/2-Spin-1-Kette auch der Grundzustand der Dimer-Plaketten-Kette. Dieser Zustand wird im Folgenden mit $<\!\infty\!>$ abgekürzt.

Fragmente

Zustände, bei denen ein oder mehrere der Quantenzahlen $S_{ab}^n = 0$ sind, sind ebenfalls Eigenzustände der Hamiltonoperatoren 3.1 und 3.2. Da die Spins zwischen zwei Singuletts $S_{ab}^{n_{1,2}} = 0$ mit $n_1 < n_2$ von den restlichen Spins entkoppeln, läßt sich der Eigenzustand als Produktzustand aus dem Eigenzustand für das Fragment der Länge $k = n_2 - n_1 - 1$, den angrenzenden Singuletts und den Eigenzuständen auf den Resten der Kette schreiben. Für M Singuletts $S_{ab}^{n_{1,2,\dots,M}} = 0$ mit $n_i < n_j$ für $i < j$ ist der Eigenzustand ein Produkt aus M (periodische Randbedingungen) beziehungsweise $M + 1$ (offene Randbedingungen) Teilstücken (Fragmenten) der Länge $k_i = n_{i+1} - n_i - 1$ und den dazwischen liegenden Singuletts $S_{ab}^{n_{1,2,\dots,M}} = 0$. Die Energie dieser Zustände ist dann die Summe der Energien der Fragmente und der Singuletts dazwischen.

[1] Der Begriff Länge oder Spinlänge s wurde in Analogie zur klassischen Vektorlänge gewählt und wird im Quantenfall über $s(s+1) = \langle \mathbf{S}^2 \rangle$ definiert.

Sind alle Fragmente klein genug (etwa $k_i < 9$), so läßt sich die Energie des Zustandes exakt bestimmen.

Haben alle Fragmente die gleiche Länge k, ist die Energie pro Plakette $E/Np = -3J_f/4 + E_k/k$. Dieser Zustand wird mit $<k>$ abgekürzt.

Sind alle Quantenzahlen $S_{ab}^n = 0$, so ist die Länge der Fragmente $k_n = 0$. Der Zustand ist dann ein Produktzustand und wird durch

$$|\Psi_{0\ldots0}\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)^{N_p} \prod_{n=1}^{N_p} \left(\uparrow_a^n\downarrow_b^n - \downarrow_a^n\uparrow_b^n\right) \prod_{n=1}^{N_p} \left(\uparrow_\alpha^n\downarrow_\beta^n - \downarrow_\alpha^n\uparrow_\beta^n\right) \tag{3.4}$$

mit der Energie $E/N_p = -3J_f/4 - 3J_d/4$ beschrieben. Die unteren Indizes von $\Psi_{0\ldots0}$ stehen für die Quantenzahlen $(S_{ab}^1 \ldots S_{ab}^{N_p})$ und N_p ist die Anzahl der Plaketten. Dieser Zustand wird im Folgenden als Dimer- oder Singulettproduktzustand bezeichnet und mit $< 0 >$ abgekürzt.

Der Haldane-Fall $|J_d| \gg |J_p|$

Für kleine Austauschwechselwirkungen J_p läßt sich der Hamiltonoperator 3.1 für den Grundzustand entwickeln. In zweiter Ordnung Störungstheorie in J_p/J_d lautet der effektive Hamiltonoperator für antiferromagnetische Dimer-Bindungen $J_d > 0$ dann

$$H_{eff}^{af} = -\frac{3}{4}J_d N_p + \frac{J_p^2}{J_d}\sum_{n=1}^{N_p}\left(\frac{1}{2}\mathbf{S}_{ab}^n\mathbf{S}_{ab}^{n+1} - 1\right). \tag{3.5}$$

Damit ist der Operator für $J_p/J_d \ll 1$ äquivalent zur s=1-Haldane-Kette mit einem effektiven Austauschparameter $J_{eff} = J_p^2/(2J_d)$ (siehe Anhang G.1).

Bei starker ferromagnetischer Dimer-Kopplung $J_d < 0$ ist der effektive Hamiltonoperator

$$H_{eff}^{fm} = +\frac{1}{4}J_d N_p + \frac{J_p}{2}\sum_{n=1}^{N_p}\left(\mathbf{S}_{\alpha\beta}^n\mathbf{S}_{ab}^n + \mathbf{S}_{ab}^n\mathbf{S}_{\alpha\beta}^{n+1}\right) \tag{3.6}$$

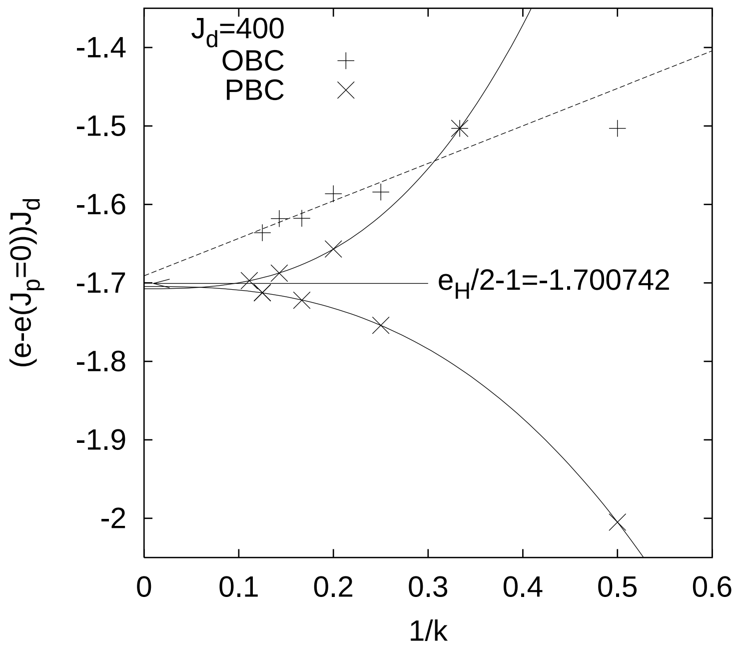
schon in erster Ordnung eine Spin-1-Kette mit doppelter Länge $2N_p$. Der Verbundspin $\mathbf{S}_{\alpha\beta}^n = \mathbf{S}_\alpha^n + \mathbf{S}_\beta^n$ entsteht durch die starke ferromagnetische Dimer-Kopplung. Die Grundzustandsenergie kann damit für den Fall schwacher Plakettenbindung J_p durch die Grundzustandsenergie der Haldane-Kette $\epsilon_H = E_H/N_H = -1.401\,484\,038\,971$ [21, 22] genähert werden. Bild 3.2 zeigt, wie gut die Störungstheorie mit extrapolierten Daten endlicher Kettenlängen bis $N_p = 9$ (entspricht 36 Spins) übereinstimmen.

Der Fall schwacher Dimer-Kopplung $|J_d| \ll |J_p|$

Der zum eben betrachteten Haldane-Fall entgegengesetzte Grenzfall ist der Fall schwacher Dimer-Kopplung $|J_d| \ll |J_p|$. Hier liefert Störungstheorie für J_d/J_p bei antiferromagnetischer Plaketten-Kopplung $J_p > 0$

$$E/N_p = -2J_p - \frac{43}{576}\frac{J_d^2}{J_p} \tag{3.7}$$

als Grundzustandsenergie (siehe Anhang G.1).



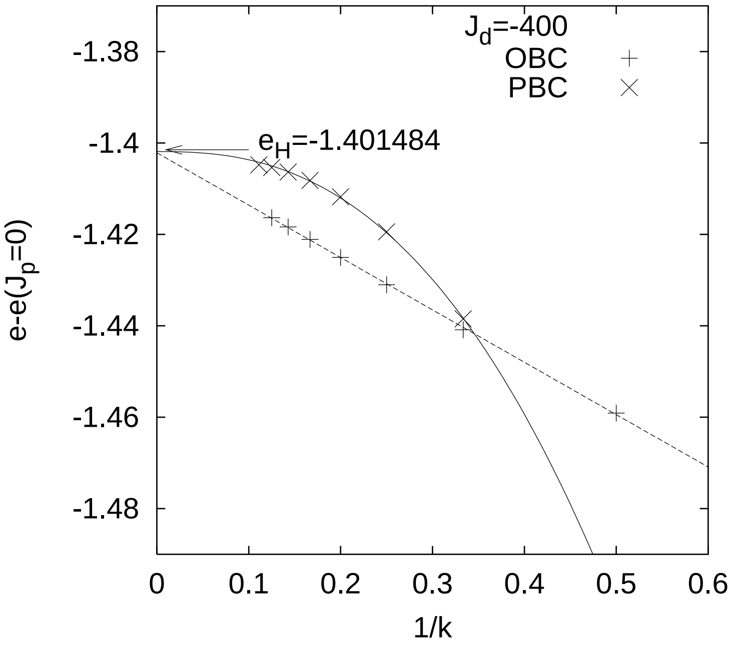


Abbildung 3.2: Extrapolation der Grundzustandsenergien $e^{PBC} = E/k$ und $e^{OBC} = E/(k+1)$ für endliche Ketten mit k Plaketten bei starker Dimerkopplung J_d (Haldane-Fall). Zur besseren Darstellung wurde die Energie $e(J_p = 0)$ subtrahiert und im Fall antiferromagnetischer Kopplung $J_d > 0$ mit dem Faktor J_d versehen. Die Übereinstimmung der extrapolierten Energien aus exakter Diagonalisierung (Kreuze) mit denen der Störungstheorie (Pfeile) ist sehr gut. Neben Daten von Ketten mit periodischen Randbedingungen (PBC, $N = 4k$) sind auch Daten für offene Randbedingungen (OBC, $N = 4k + 2$) dargestellt.

3.3.2 Der frustrierte Fall $J_f > 0$

Wegen Gleichung 3.3 ist die Energie proportional zu J_f ($E \propto J_f$) und läßt sich damit als Summe

$$E = E_{d-p} + E_f = E_{d-p} + J_f\left(\frac{1}{4}N_t - \frac{3}{4}N_s\right) \tag{3.8}$$

darstellen. N_s ist die Anzahl der Plaketten mit $S^n_{ab} = 0$ und N_t ist die Anzahl der Plaketten mit der lokalen Quantenzahl $S^n_{ab} = 1$, wobei die Nebenbedingung $N_p = N_s + N_t$ gilt. Endliche Frustration $J_f > 0$ kann Zustände mit Quantenzahlen $S^n_{ab} = 0$ begünstigen, da jedes Singulett $S^n_{ab} = 0$ einen Energiegewinn von J_f mit sich bringt. Für genügend starke Frustration J_f muß sich der Grundzustand ändern (Bild 3.3). Im Extremfall starker Frustration $J_f \gg |J_p|$ sind alle Quantenzahlen $S^n_{ab} = 0$, und der Grundzustand ist ein Produktzustand aus Singuletts (3.4).

Mit diesen Argumenten ist klar, daß es mindestens einen durch J_f getriebenen Grundzustandsübergang geben muß. In den Arbeiten [17, 18] zeigen die Autoren, daß im Falle antiferromagnetischer Kopplung genau ein kritisches J^c_f existiert. Unterhalb dieses Wertes hat das System seinen Grundzustand mit allen lokalen Quantenzahlen S^n_{ab} gleich 1 und wird hier mit $<\infty>$ abgekürzt. Oberhalb der kritischen Frustration $J_f > J^c_f$ springen alle Plakettenspinpaare in den Singulettzustand $S^n_{ab} = 0$. In diesem Fall zerfällt die Dimer-Plaketten-Kette in eine Kette entkoppelter Dimer- und Plakettensinguletts beschrieben durch (3.4).

Bild 3.4 zeigt den quantitativen Verlauf der kritische Frustration J^c_f als Funktion der Dimerkopplung J_d für antiferromagnetische Kopplungen J_p und J_d.

Läßt man auch ferromagnetische Kopplung $J_d < 0$ zu, so läßt sich zumindest für große Dimerkopplung $|J_d| \gg |J_p|$ ein reichhaltigeres Phasendiagramm erwarten. In ihrer Arbeit zur gemischten Heisenbergkette [23] zeigten Niggemann *et al.*, daß eine Kette aus Plaketten, an deren Verbindungspunkten Spins der Länge S sitzen, je nach Stärke der frustrierenden Kopplung J_f zwischen den S=1/2-Spins der Plakettenecken mehrere Grundzustandsphasen besitzt. Genau diesen Grenzfall liefert die Dimer-Plaketten-Kette bei starker ferromagnetischer Dimerkopplung, da dann beide Spins einen neuen effektiven S=1-Spin bilden, der zwischen zwei benachbarten Plaketten sitzt. Für diesen Fall existiert eine Sequenz von Übergängen $<0>\rightarrow<1>\rightarrow<2>\rightarrow<3>\rightarrow<\infty>$. Im folgenden sollen die Grundzustandsphasen für beliebige ferromagnetische Kopplung $J_d < 0$ bestimmt werden.

Für die Bestimmung der Grundzustandsenergien soll zunächst zwischen den Zuständen mit verschiedenen Quantenzahlen S^n_{ab} unterschieden werden. Wie bereits in Abschnitt 3.3.1 beschrieben, läßt sich der Grundzustand der Kette als Produktzustand von Teilketten (Fragmenten) beschreiben, wenn einige dieser Quantenzahlen Null sind. Die Fragmente haben im Grundzustand den Gesamtspin $S = 0$ ($J_d > 0$ und gerade Fragmentlänge) oder $S = 1$ ($J_d < 0$ *oder* ungerade Fragmentlänge), da die Frustration nur die Energie und nicht den Zustand ändert und somit das Lieb-Mattis-Theorem [16] angewendet werden kann.

Ohne und bei geringer Frustration J_f befindet sich die Kette im Zustand $<\infty>$. In diesem Zustand sind alle Quantenzahlen $S^n_{ab} = 1$ und der Grundzustand hat die Energie

$$e^f_\infty = E^f_\infty / N_p = e_\infty + J_f/4 \tag{3.9}$$

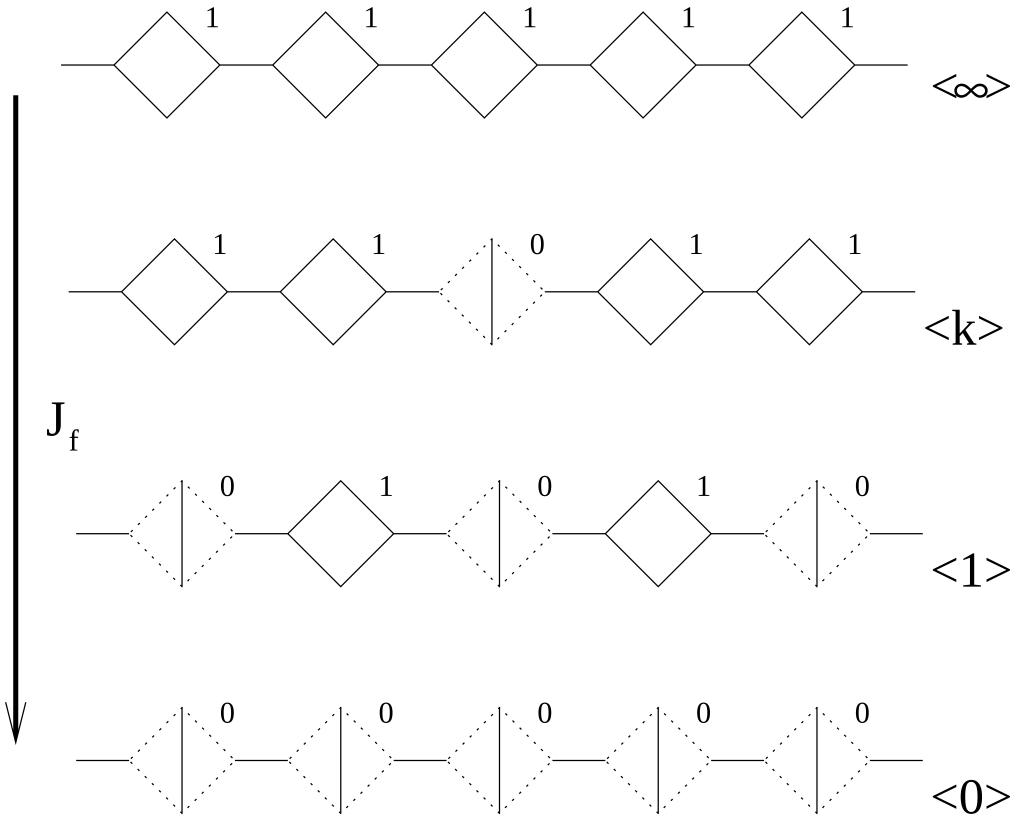


Abbildung 3.3: Ohne und bei geringer Frustration befinden sich oberer und unterer Spin jeder Plakette im Triplettzustand $S_{ab}^n = 1$ (oben). Mit zunehmender Frustration zerfällt die Kette in Bruchstücke (Fragmente) der Länge k. Die Fragmente werden jeweils durch Plakettensinguletts $S_{ab}^n = 0$ getrennt (durch vertikale Linien hervorgehoben). Bei hoher Frustration ist die Kette vollständig in Dimer- und Plaketten-Singuletts zerfallen (unten).

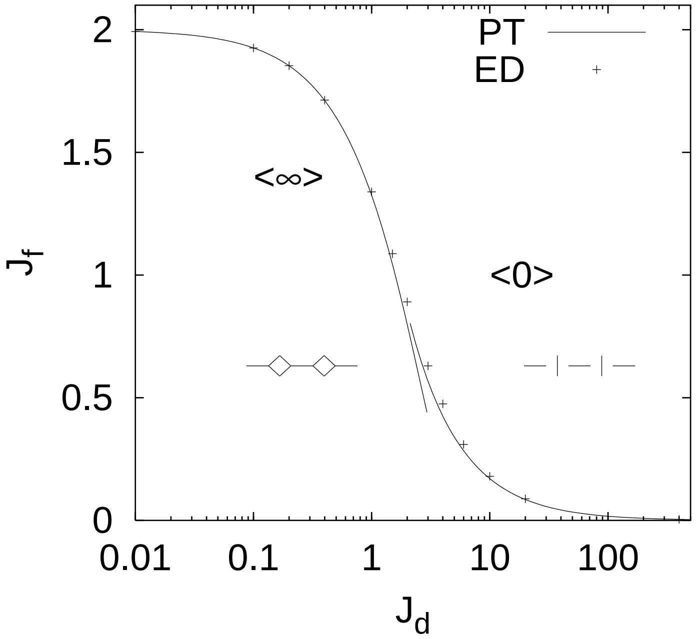


Abbildung 3.4: Die Abbildung zeigt das Grundzustandsphasendiagramm in Abhängigkeit von J_d und J_f (J_p=1). Im Falle antiferromagnetischer Kopplung $J_d > 0$ existieren zwei Grundzustandsphasen. Im Bereich $< 0 >$ ist $\Psi_{0\ldots0}$ (Formel 3.4) Grundzustand. Im Bereich $<\infty>$ ist der Zustand mit S^n_{ab}=1 für n=1...N_p (Fragmentlänge $k = \infty$) Grundzustand und dessen Energie wurde durch Extrapolation der Energien endlicher Gitter (ED) bestimmt. Der statistische Fehler dieser Extrapolation führt zu Fehlern in Größenordnung der Strichdicke. Neben Daten aus exakter Diagonalisierung (ED) werden auch Daten aus Störungstheorie (PT) präsentiert.

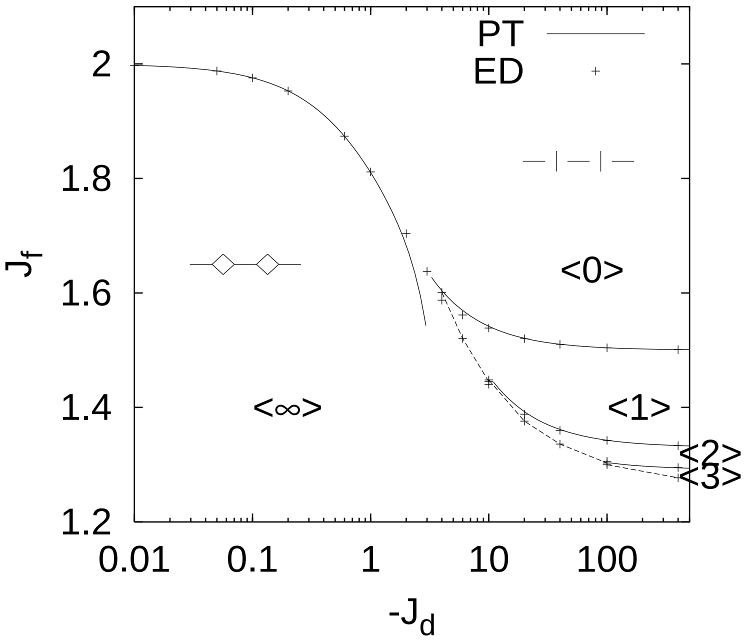


Abbildung 3.5: Die Abbildung zeigt das Grundzustandsphasendiagramm in Abhängigkeit von J_d und J_f (J_p=1). Im Falle ferromagnetischer Kopplung $J_d < 0$ existieren fünf Grundzustandsphasen $< k >$ mit den charakteristischen Fragmentlängen k=0…3 und $k = \infty$ (S^n_{ab}=1 für n=1…N_p). Neben der schon im Falle antiferromagnetischer Kopplung $J_d > 0$ vorkommenden Grundzustandsphasen $< 0 >$ und $<\infty>$ treten im Fall starker ferromagnetischer Kopplung $J_d \ll 0$ weitere Phasen mit Fragmentlängen $k = 1, 2, 3$ auf. Die Energie des unfragmentierten Grundzustandes wurde durch Extrapolation der Energien endlicher Gitter (ED) bestimmt. Der statistische Fehler dieser Extrapolation führt zu Fehlern in Größenordnung der Strichdicke. Neben Daten aus exakter Diagonalisierung (ED) werden auch Daten aus Störungstheorie (PT) präsentiert.

mit e^f als Energie[2] pro Einheitszelle. Dabei ist e_∞ die Energie des Grundzustandes der Kette ohne Frustration. Sie soll später durch Extrapolation der Energien endlicher Systeme und Störungstheorie näherungsweise bestimmt werden. Bei stärkerer Frustration können Zustände mit $S^n_{ab} = 0$ energetisch günstiger werden. Die Energien dieser Zustände können dann durch die Summation über die Kettenfragmente der Länge k zwischen den Singuletts $S^n_{ab} = 0$ und $S^{n+k+1}_{ab} = 0$ bestimmt werden. Dabei haben Zustände mit identischen Fragmentlängen geringere Energien als Zustände mit Fragmenten unterschiedlicher Länge[3] [23]. Die Energie der Kette im Zustand $< k >$ ist dann die Summe der Energien der Fragmente $E_k + kJ_f/4$ und der Energien der die Fragmente voneinander trennenden Singuletts $-3J_f/4$. E_k ist dabei die Energie des Fragmentes ohne Frustration mit k Plaketten und $k+1$ Dimer-Bindungen und entspricht der Energie einer endlichen Dimer-Plaketten-Kette mit $4k+2$ Spins und offenen Randbedingungen. Die Gesamtenergie der Dimer-Plaketten-Kette pro Elementarzelle ergibt sich durch Summation der Energie der Fragmente und der sie trennenden Singuletts zu

$$e^f_k = \frac{E_k - 3J_f/4 + kJ_f/4}{k+1} = \frac{E_k + (k-3)J_f/4}{k+1}. \tag{3.10}$$

Die Energie der Kettenfragmente E_k läßt sich bei den derzeit verfügbaren Rechenmaschinen und Algorithmen zumindest bis zu einer Fragmentlänge von ca. $k = 8$ mit $N = 34$ Spins exakt bestimmen. Für größere Fragmentlängen und für den Zustand $<\infty>$ müssen Näherungsmethoden benutzt werden. Für die Grenzfälle $|J_d|/|J_p| \ll 1$ und $|J_p|/|J_d| \ll 1$ ist Störungstheorie geeignet. Es zeigt sich, daß die Störungstheorie auch für den Bereich $|J_d|/|J_p| \approx 1$ mit für $N \to \infty$ extrapolierte Energien endlicher Systeme vergleichbare Resultate liefert (Bild 3.4 und 3.5).

Der Haldane-Fall $|J_d| \gg |J_p|$

Für endliche Kettenlängen mit offenen Randbedingungen sind die Energien der Haldane-Kette in Tabelle 3.2 aufgeführt. Sie bilden die Korrekturen in erster Ordnung bei der Entwicklung um $J_p = 0$ für den Fall endlicher Fragmentlängen k.

Mit diesen Korrekturen ist die Grundzustandsenergie mit Gleichung 3.10 und

$$\begin{aligned} E_k &\doteq \frac{k+1}{4}J_d + \frac{J_p}{2}E_H(2k+1) \quad \text{für} \quad J_d < 0 \quad \text{bzw.} \\ E_k &\doteq -\frac{3(k+1)}{4}J_d + \frac{J_p^2}{J_d}\left(\frac{E_H(k)}{2} - k\right) \quad \text{für} \quad J_d > 0 \end{aligned} \tag{3.11}$$

auch für endliche k als Näherung für kleine J_p/J_d definiert. Dabei entsprechen die Energien E_k den Erwartungswerten der effektiven Hamiltonoperatoren 3.5 und 3.6 mit offenen Randbedingungen definiert durch $k = N_p$ Plaketten und $k+1$ Dimer-Bindungen.

[2] Ich benutze die kleinen Buchstaben e und ϵ für intensive Größen, den großen Buchstaben E für extensive Größen.

[3] Das Problem läßt sich als "linear programming problem" (LP) formulieren und lösen (siehe [23] und Referenzen darin.).

Tabelle 3.2: Energien $E_H(N_H)$ endlicher Heisenberg-Spin=1-Ketten (Haldane-Ketten) mit offenen Randbedingungen und N_H Plätzen ($J = 1$).

N_H	$E_H(N_H)$	N_H	$E_H(N_H)$
2	-2.00000000	3	-3.00000000
4	-4.64575131	5	-5.83021252
6	-7.37027497	7	-8.63453198
8	-10.12463722	9	-11.43293164
10	-12.89456013	11	-14.23035897
12	-15.67401029	13	-17.02826597
14	-18.45985266	15	-19.82703587
16	-21.25021799	17	-22.62668359

Kritische Frustration

Um die Grenzen zwischen den einzelnen durch k charakterisierten Grundzustandsphasen zu bestimmen, müssen die Energien der Phasen verglichen werden. Das kritische $J_f^{k1,k2}$ definiert sich dann mit $e_{k1}^f = e_{k2}^f$ zu

$$J_f^{k,\infty} = E_k - (k+1)e_\infty \qquad \text{bzw.} \qquad J_f^{k-1,k} = (k+1)E_{k-1} - (k)E_k. \tag{3.12}$$

Bild 3.6a-d zeigt die niedrigsten Energien der Zustände $< k >$ mit Fragmenten der Länge $k = 0, 1, 2, 3, \ldots$ und $k = \infty$ in Abhängigkeit von J_f für verschiedene Dimerkopplungen J_d. Die Abbildungen sind vertikale Schnitte durch das Phasendiagramm 3.5 an den Punkten $J_d = -0.1, -6, -400$. Aus den Schnittpunkten der Energien lassen sich bis zu vier Grundzustandsphasengrenzen erkennen. Die letzte Abbildung zeigt die exakten Daten für den Grenzfall $J_d = -\infty$ mit der maximalen Anzahl von fünf verschiedenen Grundzuständen.

Wechselwirkung der Fragmentenden

Zum Abschluß dieses Abschnittes möchte ich hier noch eine Interpretation der Phasenübergänge benutzen, wie es von Niggemann *et al.* [23] bereits für gemischte Ketten vorgeschlagen wurde. Sie basiert auf die Zerlegung der Energie der Kettenfragmente E_k in drei Bestandteile:

$$E_k = ke_\infty + e_0 + e_{int}(k) \tag{3.13}$$

- e_∞ - Energie pro Einheitszelle der perfekten unendlich langen Kette
- e_0 - Energie der (unendlich weit entfernten) Fragmentenden (OBC)
- $e_{int}(k)$ - Wechselwirkung zwischen Fragmentenden

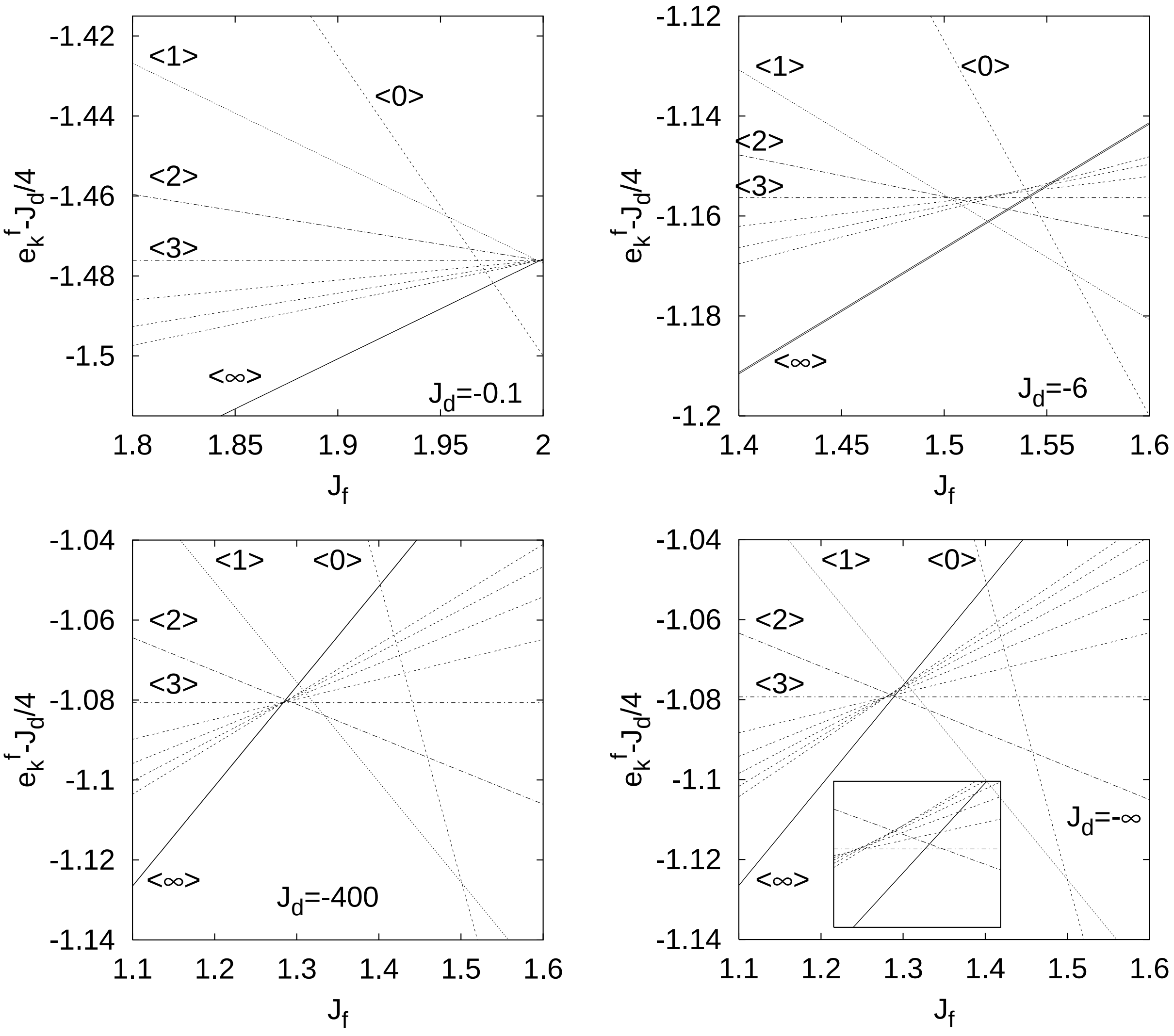


Abbildung 3.6: Schnittpunkte der Energien e_k^f aus Gleichung 3.10 in Abhängigkeit von J_f für verschiedene ferromagnetische Dimerkopplungen (a: $J_d = -0.1$, b: $J_d = -6$, c: $J_d = -400$, d: $J_d = -\infty$). Die Energien wurden zur besseren Übersicht um $e(J_p = 0, J_f = 0) = J_d/4$ bereinigt. Die Kurven zu endlichen Fragmentlängen $k > 3$ sind auf Grund der Übersichtlichkeit nicht bezeichnet worden. Ebenso wurden Kurven mit größeren endlichen Fragmentlängen ($k \gtrsim 7$) nicht dargestellt. Für endliche Fragmentlängen $k < 8$ ist die Energie exakt. Für $k = \infty$ wurde die Energie extrapoliert. Die Genauigkeit wird durch eine Doppellinie dargestellt. Da die Genauigkeit sehr hoch ist, ist die Doppellinie nur im schlechtesten Fall $J_d = -6$ zu erkennen.

Die einzige von k abhängige Größe soll e_{int} sein. Sie verschwindet mit wachsender Fragmentlänge k. Setzt man Gleichung 3.13 in Gleichung 3.12 ein, so erhält man

$$\begin{aligned} e_\infty - J_f^{(k-1,k)} - e_0 &= (k+1)e_{int}(k-1) - ke_{int}(k) \qquad \text{und} \\ e_\infty - J_f^{(k,k+1)} - e_0 &= (k+2)e_{int}(k) - (k+1)e_{int}(k+1). \end{aligned} \tag{3.14}$$

Vorausgesetzt, daß die Sequenz der Phasenübergänge von der Art $\langle 0\rangle \to \langle 1\rangle \to \langle 2\rangle \to \ldots \to \langle k{-}1\rangle \to \langle k\rangle \to \langle\infty\rangle$ ist, erhält man durch Subtraktion von $J_f^{(k,k+1)}$ und $J_f^{(k-1,k)}$ eine geometrisch anschauliche Bedingung für die Existenz der entsprechenden Phasen:

$$\frac{J_f^{(k,k+1)} - J_f^{(k-1,k)}}{k+1} = e_{int}(k-1) - 2e_{int}(k) + e_{int}(k+1). \tag{3.15}$$

Die rechte Seite der Gleichung entspricht formal der zweiten Ableitung von e_{int}. Die Phasenübergänge existieren nur, wenn $J_f^{(k,k+1)} > J_f^{(k-1,k)}$ gilt. Damit muß auch die rechte Seite der Gleichung positiv sein, welche die geometrische Bedingung liefert, daß $e_{int}(k)$ über k aufgetragen nach oben konvex sein muß[4]. Für den direkten Übergang vom Minimum bei $\langle k\rangle$ zu $\langle\infty\rangle$ gilt entsprechend

$$\frac{J_f^{(k,\infty)} - J_f^{(k-1,k)}}{k+1} = e_{int}(k-1) - e_{int}(k). \tag{3.16}$$

Zusammen mit der obigen Gleichung führt das zu dem Schluß, daß ein konvexes Kurvenstück $e_{int}(k)$ am absoluten Minimum bei k durch einen direkten Übergang $<\!k\!>\to<\infty>$ begrenzt wird. Abbildung 3.7 zeigt die Abhängigkeit der Wechselwirkungsenergie der Fragmentenden e_{int} für verschiedene Dimerkopplungen J_d. Nur im ferromagnetischen Fall findet man konvexe Kurvenstücke, die rechts durch ein Minimum begrenzt werden. Sie sind in der Abbildung dick hervorgehoben. Im Falle $J_d = -40$ bedeutet das eine Sequenz der Übergänge von $\langle 0\rangle \to \langle 1\rangle \to \langle 2\rangle \to \langle\infty\rangle$ und für $J_d = -400$ ist die Sequenz $\langle 0\rangle \to \langle 1\rangle \to \langle 2\rangle \to \langle 3\rangle \to \langle\infty\rangle$ und damit identisch zum Grenzfall $J_d \to -\infty$.

3.4 Singulett-Triplett-Anregungslücke

In allen gefundenen Grundzustandsphasen ist der Grundzustand immer ein nicht entartetes, totales Singulett und die erste Triplettanregung ist durch eine Energielücke (gap) vom Grundzustand getrennt. Damit unterscheidet sich die Dimer-Plaketten-Kette deutlich von anderen Spin-1/2-Ketten, die wegen des Lieb-Schultz-Mattis-Theorems [15] entweder eine Energielücke besitzen oder einen nicht entarteten Grundzustand haben. Das ist kein Widerspruch, da die Dimer-Plaketten-Kette effektiv eine Spin-1/2-Spin-1-Kette darstellt.

Für die Singulettphase mit den Fragmentlängen $k = 0$ ist die Anregungsenergie Δ_k

$$\Delta_0 = \frac{3}{2}J_d + J_f + E_1(J_d, J_p) \tag{3.17}$$

exakt bestimmbar. E_1 ist die Grundzustandsenergie eines Kettenfragmentes der Länge $k = 1$ mit $N = 6$ Spins. Wegen des Lieb-Mattis-Theorems [16] ist die Quantenzahl für den Grundzustand

[4]Konvex nach oben bedeutet hier, daß der Betrachter unter der Kurve steht und nach oben schaut (z.B. $y = x^2$). Ohne klare Definition der Blickrichtung kann konkav und konvex leicht verwechselt werden.

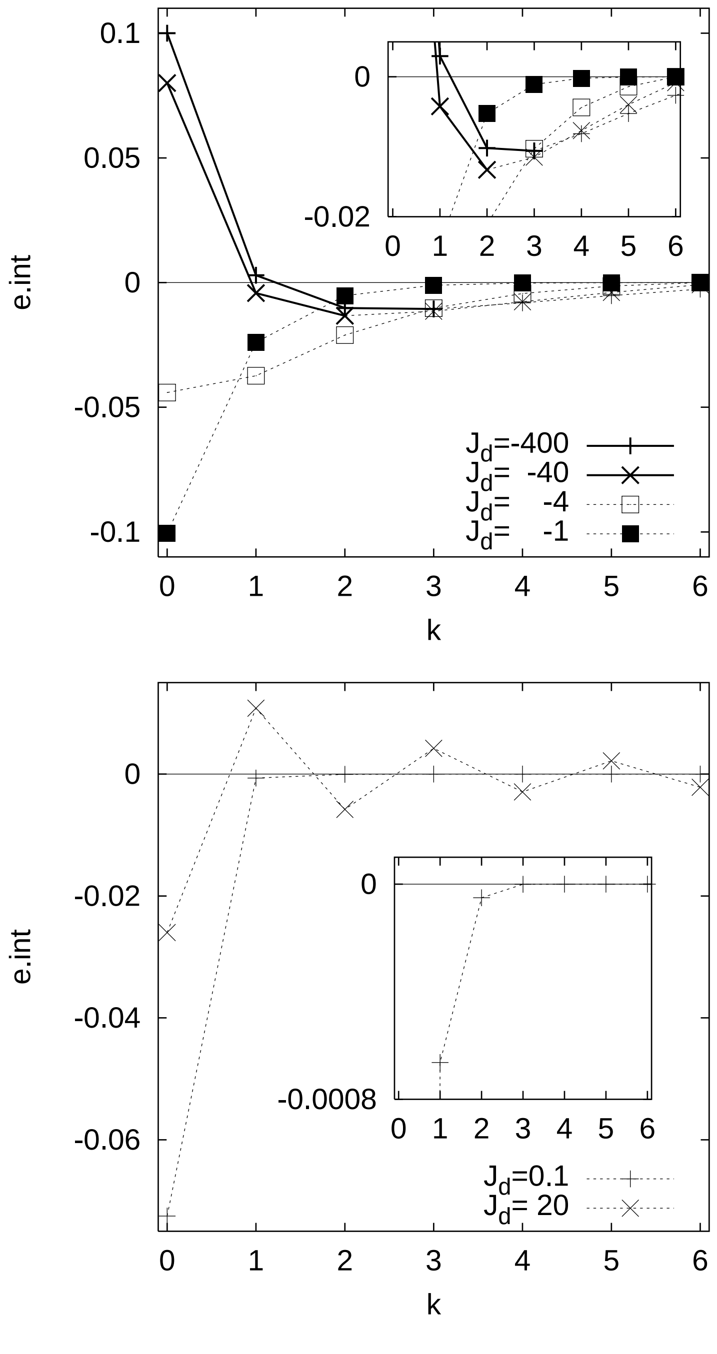


Abbildung 3.7: Wechselwirkungsenergie der Fragmentenden $e_{int}(k)$ in Abhängigkeit von der Fragmentlänge k (entspricht endlicher Kette mit offenen Randbedingungen (OBC)). Bei $k = 0$ beginnende, nach oben konvexe Kurvenstücke (dick hervorgehoben) bedeuten eine Sequenz von Phasenübergängen, bis $e_{int}(k)$ sein Minimum erreicht (siehe Text). Für antiferromagnetische Dimerkopplung J_d ist $e_{int}(k)$ von unten konkav (schwach gekoppelte Plaketten) oder eine Zickzack-Kurve (stark gekoppelte Plaketten, Haldane-Fall). Mit zunehmender ferromagnetischer Kopplung J_d wird der Verlauf der Wechselwirkungsenergie $e_{int}(k)$ teilweise konvex.

dieses Fragmentes gleich $S = |S_A - S_B| = 1$ und der Zustand ist dreifach entartet. E_1 hängt von den Austauschintegralen ab und ist im Prinzip analytisch als Lösung einer Gleichung vierten Grades berechenbar [5].

Für die Phasen mit endlicher Fragmentlänge k ist die Anregungsenergie ebenfalls durch die Energie, die aufgewendet werden muß, um ein Fragment der Länge $k+1$ zu bilden, definiert. Sie ist zumindest für die Fragmentlänge $k < 9$ numerisch exakt bestimmbar.

Die Anregungslücke der Triplettphase ($S_{ab}^n = 1$ für alle n und $k = \infty$) kann nur näherungsweise bestimmt werden. Dabei liefern Finite-Size-Skalierung und Störungstheorie hinreichend genaue Ergebnisse [18]. Störungstheorie zweiter Ordnung in J_d/J_p liefert Korrekturen zur Anregung einer Plakette

$$\Delta_p = J_p \left(1 - \frac{1}{3}\frac{J_d}{J_p} - \frac{61}{576}\frac{J_d^2}{J_p^2}\right) \qquad \text{für} \qquad J_p \gg J_d. \tag{3.18}$$

Im Fall starker Dimerbindungen $J_d \gg J_p$ ensteht ein effektiver Hamiltonoperator einer Spin-1-Kette (Haldane-Fall). Die Anregungslücke ist durch das Haldane-Gap $\Delta_H = 0.41050$ bestimmt

$$\Delta_p = \frac{J_p^2}{2J_d}\Delta_H \qquad \text{für} \qquad J_p \ll J_d, \tag{3.19}$$

wobei J_H durch den effektiven Austausch $J_p^2/(2J_d)$ ersetzt werden muß. Im Fall starker ferromagnetische Kopplung $J_d \ll 0$ ist der effektive Haldane-Austausch $J_H = J_p$.

3.4.1 Sprung an der Phasengrenze

Das Dimer-Plaketten-Modell wurde in [26] aufgegriffen, und es wurde gezeigt, daß die Anregungslücke eine Unstetigkeit an der Phasengrenze besitzt. Hier soll gezeigt werden, daß immer ein Sprung an Phasenübergängen erster Ordnung auftritt, wenn mindestens eine der Phasen eine endliche Anregungslücke besitzt[6]. Diese Tatsache läßt sich leicht aus dem unterschiedlichen Skalierungsverhalten von Grundzustands- und Anregungsenergie ableiten.

An den Phasengrenzen J_p^c kreuzen sich die Grundzustandsenergien $E_{I,II}^0(J_p)$ der beiden aneinandergrenzenden Phasen I und II (level crossing).

$$\begin{aligned} E_I^0(J_p^c) &= E_{II}^0(J_p^c) \\ N\epsilon_I^0(J_p^c) &= N\epsilon_{II}^0(J_p^c) \end{aligned} \tag{3.20}$$

Sie skalieren mit der Teilchenzahl N und sind somit extensive Größen.
Die Anregungsenergie enthält einen von der Teilchenzahl weitestgehend unabhängigen Anteil Δ

$$E_{I,II}^1 \doteq \epsilon_{I,II}^0 N + \Delta_{I,II}. \tag{3.21}$$

[5] Wegen der komplizierten Form ist die Lösung hier nicht angegeben.

[6] Genau genommen müssen die Anregungslücken rechts und links der Phasengrenze verschieden sein. Das ist in der Regel jedoch der Fall, weil die Phasen und mit ihnen die Anregungslücken unterschiedlichen physikalischen Charakter haben.

$\Delta_{I,II}$ ist eine intensive Größe. Das heißt, die Anregungen aus Phase I in der Phase I skalieren nicht mit N, wohingegen Anregungen aus der Phase II in der Phase I auch beliebig dicht an der Phasengrenze mit N skalieren

$$\begin{aligned} & E^1_I(J^c_p+\lambda) - E^0_{II}(J^c_p+\lambda) \propto N && \text{mit} \quad \lambda \to 0+ \\ \text{und} \quad & E^1_{II}(J^c_p+\lambda) - E^0_I(J^c_p+\lambda) \propto N && \text{mit} \quad \lambda \to 0-, \end{aligned} \tag{3.22}$$

da in diesem Fall $\epsilon_I \neq \epsilon_{II}$ gilt. Damit ist die Differenz der Anregungsenergien beider Phasen gleich $\Delta_{II} - \Delta_I$ und damit im allgemeinen immer endlich.

3.5 Magnetisierung - Plateaus

Erst vor kurzer Zeit wurde ein zweidimensionaler Antiferromagnet gefunden, der eine Reihe ungewöhnlicher Eigenschaften zeigt. Es handelt sich um $SrCu_2(BO_3)_2$ mit einer für Hochtemperatursupraleiter typischen Struktur, bestehend aus übereinandergestapelten antiferromagnetischen Gittern mit den Kupferatomen als Spin-1/2-Trägern und Liganden (hier BO_3). Die magnetischen Schichten sind durch magnetisch inaktive Atomlagen (hier Sr) getrennt. Neben anderen interessanten Eigenschaften wurden bei $SrCu_2(BO_3)_2$ magnetische Plateaus bei $m = 1/3$, $1/4$ und $1/8$ des vollen magnetischen Momentes beobachtet[24, 25, 26], eine bisher bei zweidimensionalen Systemen selten beobachtete Eigenschaft [30]. Die magnetischen Ebenen werden effektiv durch das frustrierte Shastry-Sutherland-Modell [119] beschrieben, und wegen der strukturellen Ähnlichkeit mit dem in dieser Arbeit untersuchten eindimensionalen Modell, soll hier das magnetische Verhalten des eindimensionalen Pendants näher untersucht werden.

Im folgenden Abschnitt soll die Magnetisierung m in Abhängigkeit vom Feld h parallel zur z-Achse bestimmt werden. Die folgenden Betrachtungen beziehen sich auf den Parametersatz $J_f = J_d = 1$ und $J_p = 0.7$, bei dem sich das System nahe der Phasengrenze befindet. Die qualitativen Argumentationen sind jedoch nicht auf diesen an $SrCu_2(BO_3)_2$ angelehnten Parametersatz beschränkt. Der Grundzustand für diesen Parametersatz ist der in Abschnitt 3.3.2 beschriebene Singulettgrundzustand $< 0 >$.

$$H_h = H_{p-d} + H_f - h \sum_{n,\nu=a,b,\alpha,\beta}^{N_p} S^{zn}_{\ \nu} \tag{3.23}$$

Der Hamiltonoperator wird dazu um das Produkt aus Magnetfeld h und der z-Komponente des Gesamtspins zu H_h erweitert ($g\mu_B = 1$). Dieser Term vertauscht mit dem Hamiltonoperator H_h und somit sind die Erwartungswerte zu diesem Term ($\langle S^z \rangle$) gute Quantenzahlen. Zunächst muß die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Gesamtmagnetisierung S [7] ermittelt werden. Ein angelegtes Magnetfeld h führt zu einem Energiegewinn proportional zur Magnetisierung $-hS$ und kippt das in Bild 3.8 dargestellte Spektrum nur um den Punkt $E(S = 0)$. Auf diese Weise kann man aus dem Spektrum $E(S)$ für $h = 0$ die Magnetisierung $m(h)$ für $h \geq 0$ ableiten.

In Bild 3.8 fallen sofort drei unterschiedliche Teilgebiete $m < 1/4$, $1/4 < m < 1/2$ und $m > 1/2$ auf. Zur besseren Sichtbarkeit enthält das untere Bild aus Abbildung 3.8 das gleiche Spektrum

[7] Für den Grundzustand bei endlichem Magnetfeld ($h > 0$) gilt $S = S^z$ und damit ist die Magnetisierung als $m = S^z/(2N_p) = S/(2N_p)$ mit $m = 0 \ldots 1$ und $\langle \mathbf{S}^2 \rangle = S(S+1)$ definiert.

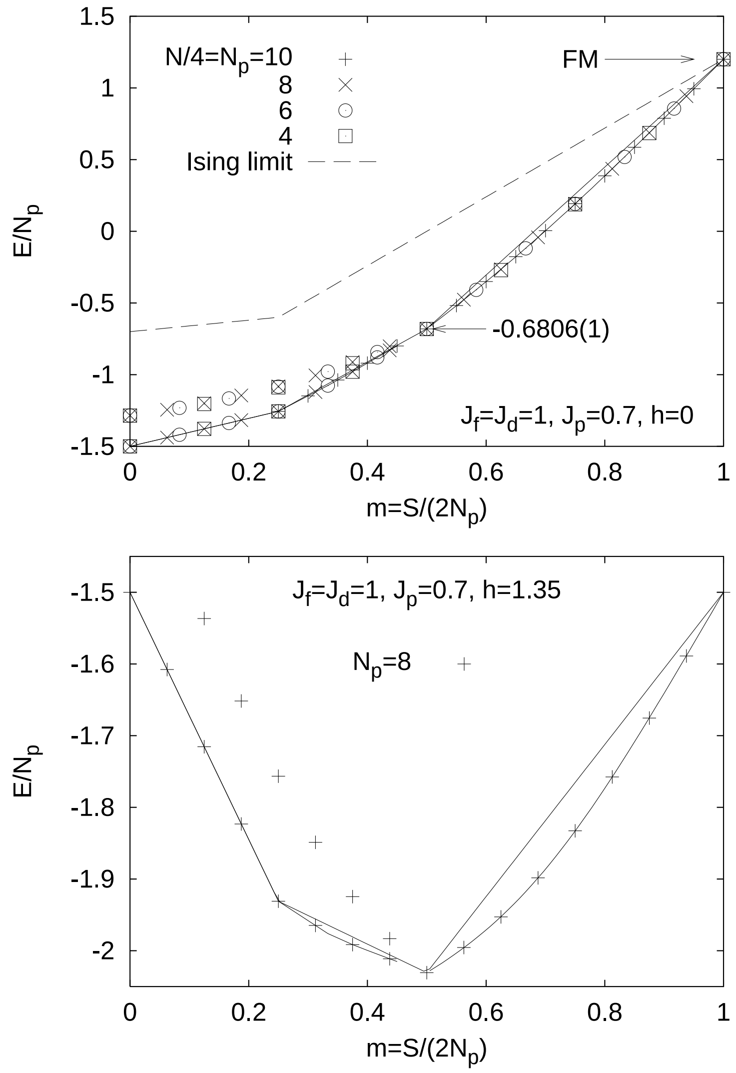


Abbildung 3.8: Spektrum der niedrigsten Energien in Abhängigkeit von der Magnetisierung bei einem Magnetfeld von $h = 0$ und $h = 1.35$. Die Magnetisierung wird hier in der Quantenzahl S gemessen. Der Anstieg der Energie entspricht dem Feld h, welches benötigt wird, um die Magnetisierung $m = S/(2N_p)$ zu erreichen. Auf der linken Seite des Diagramms liegen die niedrigsten Energien jeweils auf Geradenstücken. Darüber sind die niedrigsten Energien für die unfragmentierte Kette mit $S^n_{ab} = 1$ für alle n dargestellt. Im Punkt $m = 1$ (FM-Punkt) können die Energie und deren Anstieg exakt bestimmt werden. Der Punkt $m = 1/2$ wurde durch Extrapolation sehr genau bestimmt (siehe Text). Als Parameter wurden $J_f = J_d = 1$ und $J_p = 0.7$ analog zu [26] nahe der Phasengrenze gewählt. Die beiden Geraden zwischen den Punkten $m = 1/4$, $m = 1/2$ und $m = 1$ dienen nur zur Orientierung und heben die tiefer liegenden Datenpunkte hervor. Für $J_d \neq J_f$ findet man auch im Ising-Modell den Knick bei $m = 1/2$.

Tabelle 3.3: Abhängigkeit der Energie des $m = 1/2$-Grundzustandes $E(m = 1/2)$ für $J_p = 0.7$ und $J_f = J_d = 1$ bis zu $N = 4N_p = 40$ Plätzen. N_p ist die Anzahl der Plaketten in der Kette mit periodischen Randbedingungen (PBC).

N_p	E/N_p	N_p	E/N_p
1	-0.50000000	2	-0.70313092
3	-0.67602844	4	-0.68187420
5	-0.68023225	6	-0.68071087
7	-0.68055572	8	-0.68060683
9	-0.68058916	10	-0.68059535

um $E(S = 0)$ gedreht, was einem magnetischen Feld von $h = 1.35$ (in Einheiten von $J = J_d$) entspricht. Deutlich zu erkennen sind die unter der Verbindungslinie ($m = 1/4$, $m = 1/2$) liegenden Zustände. Auch das Isingmodell zeichnet sich durch diese drei Teilgebiete aus (für den Spezialfall $J_d = J_f$ sind es nur zwei). In jedem der Teile ist die Isingenergie proportional zu S^z, was zu zwei Magnetisierungsplateaus bei $m = 1/4$ und $m = 1/2$ führt. Da das Heisenbergmodell aus einem Isingteil und einem transversalen Anteil (Quantenfluktuationen)

$$\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j = \underbrace{S_i^z S_j^z}_{\text{Ising}} + \underbrace{\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)}_{\text{transversal}} \tag{3.24}$$

besteht, eignet sich die für das Isingmodell diskutierte Einteilung in drei Bereiche von m auch für das Heisenbergmodell [8]. Für $m = S/(2N_p) > 1/2$ enthält der Grundzustand keine Fragmente und ist in niedrigster Näherung proportional zum Quadrat der Magnetisierung $E \propto \langle \mathbf{S}^2 \rangle$ mit $\langle \mathbf{S}^2 \rangle = S(S+1)$ und verhält sich damit analog zum Antiferromagneten mit klassischen Spins, wo die Energie ebenfalls quadratisch von der Magnetisierung abhängt ($E \propto |\vec{S}|^2$). Die Abhängigkeit der Energie endlicher Systeme von der Magnetisierung kann sehr gut durch eine polynomiale Abhängigkeit von $S(S + 1)$ genähert werden.

Der maximale Anstieg von $E(S)$ findet man am ferromagnetischen Zustand mit $S = 2N_p$. Dieser ist analytisch bestimmbar und liefert damit die Feldstärke h, bei der das Modell maximal magnetisiert ist.

Der Punkt $E(S/N_p = 1/2)$ läßt sich durch Skalierung sehr genau bestimmen (siehe Bild 3.9), wobei die exakt berechneten Energien bis $N = 40$ Gitterplätze verwendet wurden (Tabelle 3.3).

Für $S/(2N_p) < 1/4$ ist die Energie wegen des einfachen Singulett-Zustandes analytisch bestimmbar. Die kleinste magnetische Anregung ist hier immer die Bildung eines Tripletts $S^i_{ab} = 1$. Dieses Triplett korreliert mit den benachbarten Spins S^i_β und S^{i+1}_α und formt ein Kettenfragment der Länge $k = 1$. Dieses Fragment bleibt jedoch vom Rest der Kette entkoppelt, da es durch Singuletts $S^{i-1}_{ab} = 0$ und $S^{i+1}_{ab} = 0$ begrenzt wird. Um die nächsthöhere Magnetisierung zu erreichen,

[8]Die meisten ausgeprägten Magnetisierungsplateaus, die im Heisenbergmodell auf bekannten Gittern ($m = 1/3$ Dreiecksgitter, $m = 1/3$ Kagomé, etc.) gefunden werden, lassen sich durch das Isingmodell erklären (triviale Plateaus).

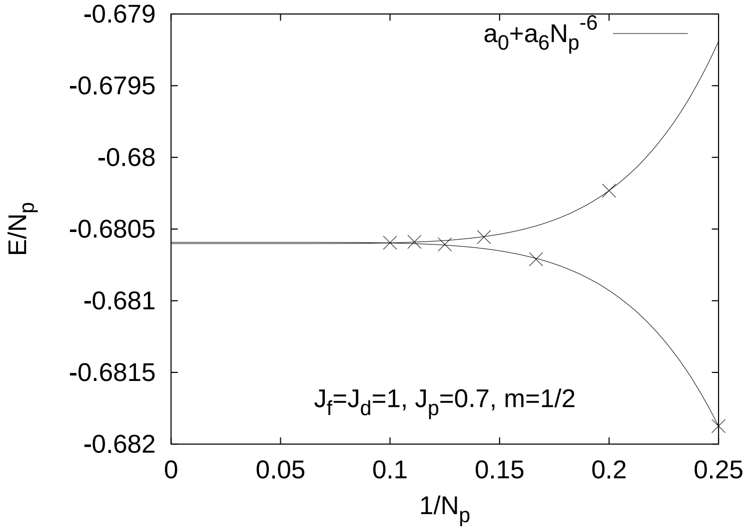


Abbildung 3.9: Finite-Size-Skalierung der Energie für den Fall halber Magnetisierung $m = 1/2$. Für eine ungerade Anzahl von Plaketten N_p konvergiert die Energie von oben, für eine gerade Anzahl von Plaketten N_p von unten gegen den selben Grenzwert $E/N_p = -0.68059(1)$. Als Parameter wurden $J_f = J_d = 1$ und $J_p = 0.7$ analog zu [26] nahe der Phasengrenze gewählt.

muß ein neues Triplett angeregt werden, das wiederum ein neues Fragment bildet. Dieser Prozeß wiederholt sich, bis sich jede zweite Plakette im Triplettzustand befindet. Dann besteht der Zustand aus einer Kette entkoppelter Fragmente der Länge $k = 1$. Gleichzeitig hat er seine maximale Magnetisierung $m = 1/4$ erreicht. Da die Energie durch Zufügen eines Fragmentes mit $S = 1$ und der Länge $k = 1$ jeweils um einen konstanten Betrag ΔE erhöht wird, ist die Energie wie im Isingfall linear zur Magnetisierung und man findet einen Sprung in der Magnetisierungskurve $m(h)$ bei $h = dE/dS$.

Um die Magnetisierung weiter zu erhöhen, müssen neue Zustände angeregt werden. Diese sind Zustände mit Fragmenten mit $S = 2$ und der Länge $k = 2$ mit zwei benachbarten Plakettentripletts. Höhere Magnetisierungen können wieder durch neue $k = 2$-Fragmente erreicht werden. Die Energie ist wieder linear zu S. Erst wenn der Zustand nur noch Fragmente der Länge $k = 2$ enthält, ändern sich die Anregungen. Das ist bei einer Magnetisierung von $m = 2/6$ der Fall.

Dieses Szenario wiederholt sich für immer weiter steigende Fragmentlängen und erzeugt damit eine Serie von Magnetisierungsplateaus

$$m_n = \frac{n}{2n+2} \qquad \text{mit} \qquad n = 0, 1, 2, ..., \tag{3.25}$$

die immer kleinere Ausdehnungen haben und schließlich im $m = 1/2$ Plateau enden. Bis zu einer Fragmentlänge von $k \leq 9$ konnten die Energien exakt berechnet werden (Tabelle 3.4). Damit sind auch die Plateaus bis $S/N_p \leq 9/20$ genau bestimmt. Für größere Magnetisierungen und speziell um das kritische Feld für $m = 1/2$ zu bestimmen, müssen wieder Näherungen gemacht werden.

Das Phasendiagramm ist somit reichhaltiger, als in [26] angenommen wurde. Jedoch sind die Plateaus bei $m = 1/4$ und $m = 1/2$ die breitesten und auffälligsten Plateaus, gefolgt von $m = 1/3$.

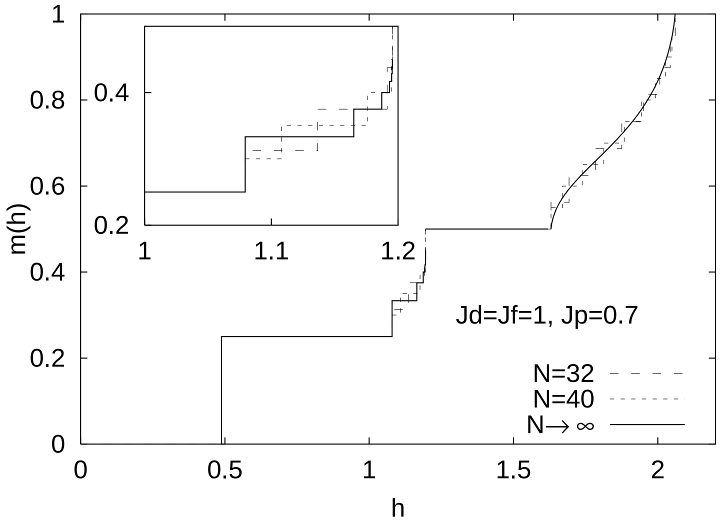


Abbildung 3.10: Magnetisierung in Abhängigkeit vom magnetischen Feld h für den thermodynamischen Limes (durchgezogene Linie) und Systeme mit endlicher Teilchenzahl (gestrichelt). Die Plateauserie $m_n = n/(2n+2)$ ist nur angedeutet. Als Parameter wurden $J_f = J_d = 1$ und $J_p = 0.7$ analog zu [26] nahe der Phasengrenze gewählt. Für $m > 1/2$ ist der Verlauf der Magnetisierung für $N = \infty$ nur qualitativ dargestellt. Zu den endlichen Systemen mit periodischen Randbedingungen passen nur die Plateaus 1/4, 3/8, 7/16 (N=32) bzw. 1/4, 4/10, 9/20 (N=40).

In Abbildung 3.10 ist die Magnetisierung noch einmal grafisch dargestellt. Zum Vergleich findet man auch die Magnetisierung für $N = 32$ und $N = 40$ Teilchen. Die Plateaus für die endlichen Gitter stimmen nur mit dem thermodynamischen Limes ($N_p \to \infty$) überein, wenn N_p für endliche Gitter ein vielfaches von $n+1$ sind, also N_p zur Länge der Fragmente paßt. Die Sättigung der Magnetisierung $m = 1$ wird bei $h_{sat} = (2J_p + J_d + \sqrt{4J_p^2 + J_d^2}\,)/2$ erreicht. Sie hängt nicht von der Frustration J_f ab. Für $J_p = 0.7$ und $J_d = 1$ ist $h_{sat} = 2.0602325$.

Da die niedrigsten Zustände für $S/(2N_p) \leq 9/20$ exakt berechenbar sind, lassen sich auch die kritischen Magnetfelder exakt berechnen, bei denen das nächste Magnetisierungsplateau erreicht wird. Da die Energie $E_k^f = E_k + kJ_f/4$ eines Fragmentes linear vom Frustrationsparameter J_f abhängt, kann die kritische Feldstärke

$$\begin{aligned} h_{crit}^{(k-1,k)} &= \frac{e_k - e_{k-1}}{2m_k - 2m_{k-1}} \\ &= kE_k^f - (k+1)E_{k-1}^f + 3J_f/4 \\ &= kE_k - (k+1)E_{k-1} + J_f \end{aligned} \tag{3.26}$$

allein aus der Energie $E_k = E_{min}(N_t = N_p = k, S = k, J_p, J_d, J_f = 0)$ der unfrustrierten endlichen Fragmente (offene Randbedingungen) berechnet werden. Die Energien E_k der unfrustrierten Fragmente hängen nur noch von J_p und J_d ab und sind für den Fall $J_d = 1$ und $J_p = 0.7$ in Tabelle 3.4 aufgeführt.

Zerlegt man E_k analog zu Niggemann *et al.* [23] in

$$E_k = ke_\infty + e_0 + e_{int}(k), \tag{3.27}$$

Tabelle 3.4: Energie der Fragmente E_k der Dimer-Plaketten-Kette in Abhängigkeit von der Länge k mit dem Gesamtspin $S_k = k$ für $J_p = 0.7$ und $J_d = 1$ ($J_f = 0$) bis zu einer Größe von $N_k = 4k + 2 = 38$ Plätzen.

k	E_k	k	E_k
0	-0.7500000	5	-5.7789991
1	-2.0119002	6	-6.7096756
2	-2.9781677	7	-7.6402882
3	-3.9158665	8	-8.5708863
4	-4.8480439	9	-9.5014810

wobei e_∞ die Energie pro Elementarzelle der perfekten unendlich langen Kette mit $m = 1/2$ ist, e_0 die Energie der Kettenenden und $e_{int}(k)$ die vom Abstand k abhängige Wechselwirkungsenergie der Kettenenden ist, so kann man $h_{crit}^{(k-1,k)}$ durch

$$h_{crit}^{(k-1,k)} = e_\infty - e_0 + ke_{int}(k) - (k+1)e_{int}(k-1) + J_f \tag{3.28}$$

ersetzen. Im Falle einer unendlichen Folge von Plateaus läßt sich mit $k \to \infty$ die Feldstärke h abschätzen, bei der die Folge in das $m = 1/2$-Plateau mündet. Sie beträgt

$$h_{crit}^{(k-1,k)}(k \to \infty) = e_\infty - e_0 + J_f. \tag{3.29}$$

Im Fall $J_f = J_d = 1$ und $J_p = 0.7$ sind $e_\infty = -0.930595$ und $e_0 = 1.126126$, womit das $m = 1/2$-Plateau bei $h = 1.195531$ beginnt. Subtrahiert man $h_{crit}^{(k-1,k)}$ von $h_{crit}^{(k,k+1)}$, so erhält man folgende Bedingung:

$$\frac{h_{crit}^{(k,k+1)} - h_{crit}^{(k-1,k)}}{k+1} = e_{int}(k+1) - 2e_{int}(k) + e_{int}(k-1). \tag{3.30}$$

Im Falle einer Plateaufolge muß die linke Seite der Gleichung positiv sein, womit die rechte Seite wieder eine Konvexitätsbedingung liefert. Bild 3.11 zeigt, daß $e_{int}(k)$ im gesamten Bereich konvex ist, woraus eine unendliche Folge von Magnetisierungsplateaus folgt.

Das oben erhaltene Resultat für das Auftreten der Magnetisierungsplateaus bei $m = n/(2n+2)$ erfüllt die Forderung von Oshikawa *et al.* [31], daß $n(s - \bar{m})$ eine ganze Zahl sein muß. Im Fall der Dimer-Plaketten-Kette ist die Periode des Grundzustandes $n = 4(k+1)$, der Spin s ist 1/2 und die Magnetisierung pro Spin $\bar{m}$ ist $k/(4k+4)$, wobei die Größe $\bar{m}$ halb so groß, wie die in dieser Arbeit verwendete Magnetisierung m ist.

3.6 Zusammenfassung

Die eindimensionale Dimer-Plaketten-Kette ist ein einfaches und trotzdem physikalisch reichhaltiges Modell. Ohne Frustration wird der Grundzustand im Quantenfall $s = 1/2$ durch die Konkurrenz zwischen Dimer- und Plakettensinguletts charakterisiert, wohingegen bei klassischen Spins der Néelzustand Grundzustand ist. Bei starker Frustration J_f können sich eine Reihe von

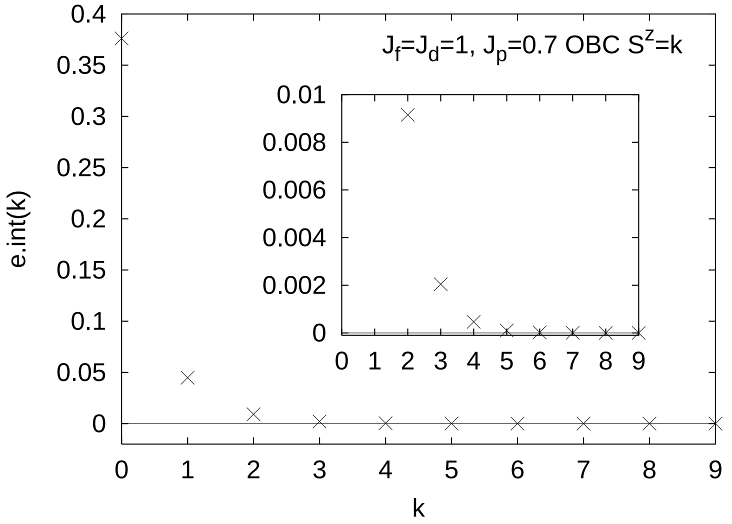


Abbildung 3.11: Wechselwirkungsenergie der Kettenenden $e_{int}(k)$ in Abhängigkeit von der Kettenlänge k bei offenen Randbedingungen (OBC) und $m = 1/2$ für $J_d = 1$ und $J_p = 0.7$. Das innere Bild zeigt die Energie 40-fach vergrößert.

lokalen Singuletts bilden, die auf Grund der Symmetrie des Systems zu einer Entkopplung einzelner Teile der Kette führen. In diesem Fall ist das Modell durch die Summe einzelner Kettenfragmente darstellbar (Produktzustand), und die physikalischen Eigenschaften des Grundzustandes sind exakt beschreibbar. Diese Fragmentierung der Kette ist ein reiner Quanteneffekt und tritt im klassischen Modell nicht auf.

Das System zeigt eine Reihe von Phasenübergängen erster Ordnung und enthält zwei bekannte Grenzfälle. Das ist zum einen die Spin-1-Spin-1/2-Plaketten-Kette ($J_d \ll 0$,[23]) und zum anderen der Haldane Fall (Spin-1-Kette, $J_d \gg J_p$).

Alle Phasen sind magnetisch nicht geordnet und besitzen eine Anregungslücke. An den Phasengrenzen hat die Anregungslücke einen Sprung.

Die Grundzustandsphasen für ferromagnetische Dimerkopplung $J_d < 0$ mit endlichen Fragmentlängen $k = 0, 1, 2, 3$ sind hoch entartet, da jedes Fragment mit $S = 1$ dreifach entartet ist und zusätzlich noch die Position der Fragmente für $k > 0$ verschoben werden kann.

Die Magnetisierung einer solchen Kette zeigt ein sehr exotisches Verhalten. Neben den bereits in [26] gefundenen Magnetisierungsplateaus bei $m = 1/4$ und $m = 1/2$ konnten eine ganze Serie von Plateaus bei $n/(2n + 2)$ mit $n = 0, 1, 2, \ldots, \infty$ gefunden werden. Das ist nach bisherigem Kenntnisstand das erste Modell, das eine *unendliche* Reihe von magnetischen Plateaus zeigt. Mit diesen neuen Ergebnissen kann man das magnetische Phasendiagramm aus [26] neu bestimmen. Da das klassische System $s = \infty$ keine Plateaus in der Magnetisierung besitzt, wäre es interessant, das System auch für endliche Spinlängen $1/2 < s < \infty$ zu untersuchen.

Das eindimensionale Modell enthält prinzipiell die Strukturen, die auch in einigen zweidimensionalen Kupraten zu finden sind. Inwiefern sich die Szenarien des eindimensionalen Modells auf die zweidimensionalen Systeme übertragen lassen, muß durch weitere Untersuchungen festgestellt werden.

Kapitel 4

Der Heisenberg-Antiferromagnet auf den archimedischen Tilings

4.1 Magnetische Ordnung in zwei Dimensionen

Das Heisenbergmodell (1.1) läßt sich durch Aufspaltung in Terme parallel und senkrecht zur z-Richtung verallgemeinern. Man erhält dadurch das sogenannte XXZ-Modell [14]

$$H = \sum_{<i,j>} J_{ij} \left[\Delta S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] , \tag{4.1}$$

welches im isotropen Fall $\Delta = 1$ das Heisenbergmodell liefert. Für $1/\Delta = 0$ geht der Quantencharakter des XXZ-Modells 4.1 verloren, und man erhält das mit dem Heisenbergmodell verwandte Isingmodell. Folglich vertauschen im Ising-Fall alle auftretenden Operatoren miteinander. Trotz der fehlenden Quantenfluktuationen hat das Isingmodell wie das Heisenbergmodell diskrete Energiespektren, weshalb es auch als semiklassisches Modell bezeichnet werden kann. Das Isingmodell erlaubt nur zwei Spineinstellungen parallel oder antiparallel zur z-Achse. Es ist das einfachste Modell für Ferromagnetismus, welches Phasenübergänge und kritische Phänomene beschreibt, und wurde 1920 von W. Lenz eingeführt [10]. Ernst Ising löste das Modell 1925 für eine Dimension [5]. Er fand keinen Curie-Punkt $T_c > 0$ und erwartete auch für höhere Dimensionen keine geordneten Phasen. Erst 20 Jahre nach Formulierung des Isingmodelles fand Lars Onsager im Jahr 1944 für das ferromagnetische Isingmodell auf dem Quadratgitter eine exakte Lösung mit einem geordneten Grundzustand und einer kritischen Temperatur $T_c > 0$ [11].

Später wurde gezeigt, daß auch andere zweidimensionale Gitter wie das Honigwabengitter und das Dreiecksgitter einen ferromagnetisch geordneten Zustand für $0 < T < T_c$ besitzen [13]. Vergleicht man dabei die kritischen Temperaturen (Honigwabengitter $T_c = 1.5187$, Kagomé-Gitter $T_c = 2.1433$, Quadratgitter $T_c = 2.2692$, Dreiecksgitter $T_c = 3.6410$), so fällt auf, daß T_c stark von der Struktur des Gitters abhängt. So wächst die kritische Temperatur T_c mit der Dimension D (hyperkubisch: $T_c \approx 2.21D - 2.15$) und der Koordinationszahl z (Zahl der nächsten Nachbarn, $D = 2$: $T_c \approx 0.7z - 0.57$).

Für das Isingmodell mit antiferromagnetischer Kopplung ist die Topologie des Gitters noch wichtiger. So unterscheidet Onsagers Lösung [11] nicht zwischen Ferromagnetismus und Antiferromagnetismus, was mit der Bipartitheit des Quadratgitters zusammenhängt [12], daß heißt mit der Tatsache, daß jeder Spin des Untergitters A nur mit Spins des Untergitters B wechselwirkt. Diese Symmetrie läßt sich auch für andere bipartite Gitter nutzen [12]. Bei nichtbipartiten Gittern ist die Situation jedoch schwieriger. So ist das Dreiecksgitter mit antiferromagnetischer Kopplung frustriert. Frustration bedeutet, daß benachbarte Spins sich nicht gleichzeitig antiparallel ausrichten können, um ihre paarweise Bindungsenergie zu minimieren. Wannier [12] zeigte 1950, daß das antiferromagnetische Isingmodell auf dem Dreiecksgitter für beliebige Temperaturen ungeordnet ist. Er wies gleichzeitig darauf hin, daß sich für antiferromagnetische Kopplungen im Gegensatz zu ferromagnetischen Kopplungen das Isingmodell und das quantenmechanische Heisenbergmodell wesentlich unterscheiden.

Seit 1967 [51, 52, 53] ist bekannt, daß isotrope Spin-s-Heisenberg-Quantensysteme mit kurzreichweitiger antiferromagnetischer Wechselwirkung in einer Dimension keine magnetisch ferngeordneten Grundzustände einnehmen können, da Quantenfluktuationen Fernordnung sofort zerstören. Man weiß jedoch auch, daß höhere Dimensionen wiederum Ordnung begünstigen. So wurde 1988 bewiesen, daß der Grundzustand des Heisenberg-Antiferromagneten (HAFM) auf dem kubischen Gitter ferngeordnet ist [39]. Für zweidimensionale Modelle existieren Beweise für magnetische Ordnung nur für $s \geq 1$ (Quadratgitter und Honigwabengitter) oder für $s = 1/2$ mit anisotropen Austausch (Quadratgitter, $0 \leq \Delta < 0.13$ und $\Delta > 1.78$) [72]. Es gibt bisher aber keine generellen Beweise zur Existenz eines geordneten Grundzustandes für zweidimensionale Systeme mit isotroper Kopplung und $s = 1/2$.

Allerdings untermauern umfangreiche Untersuchungen mit verschiedensten Methoden die Annahme, daß der isotrope HAFM mit $s = 1/2$ auf dem Quadratgitter [71, 72] und dem Dreiecksgitter geordnet ist [92]. Ursprünglich wurde jedoch angenommen, daß der Grundzustand des HAFM auf dem Dreiecksgitter ungeordnet ist [78, 79, 80], erst später fand man zunehmend Hinweise, die dieser Annahme widersprechen.

Einen vermutlich ungeordneten Grundzustand hat der HAFM auf dem Kagomé-Gitter [104, 114]. Für etliche andere HAFM auf zweidimensionalen Gittern, insbesondere auf frustrierten Gittern, ist viel weniger bekannt oder die Diskussion über die Natur des Grundzustandes ist sehr kontrovers. Für den Fall $T \neq 0$ existiert das Mermin-Wagner-Theorem [51], welches ferromagnetische oder Néel-artige Ordnung für ein isotropes Modell[1] mit kurzreichweitiger[2] Kopplung in ein und zwei Dimensionen verbietet.

Ziel dieser Arbeit soll es sein, einen Überblick über die mögliche Natur des Grundzustandes des HAFM auf einer ganzen Klasse von zweidimensionalen Gittern zu geben. Diese Klasse wird aus den 11 archimedischen Gittern gebildet, die im folgenden Abschnitt beschrieben werden.

4.2 Archimedische Gitter

Die bekanntesten Vertreter der zweidimensionalen Gitter sind die regulären Tilings oder Parkettierungen. Dazu gehören Gitter, die aus periodisch angeordneten identischen, regulären Polygonen (Vielecken) bestehen. Diese sind das Dreiecksgitter, das Quadratgitter und das Honigwabengitter. Läßt man auch Parkettierungen aus verschiedenen Polygonen zu, jedoch mit der

[1] Der klassische Fall $s \to \infty$ ist hier eingeschlossen.

[2] Ein Modell mit unendlich-reichweitiger Wechselwirkung ist zum Beispiel das Lieb-Mattis-Modell, das ohne weiteres Ordnung bei $T > 0$ zeigen kann [59].

Einschränkung, daß alle Plätze völlig äquivalent sein sollen, so erhält man die uniformen Tilings, auch archimedische Tilings genannt. Aus geometrischen Gründen existieren genau 11 verschiedene archimedische Tilings. Davon ist eines in zwei enantiomorphischen Formen vorhanden (links- und rechtshändig). Der Leser kann in [50] weitere Informationen zu den mathematischen Eigenschaften und Einteilungen der Tilings finden. Erste Arbeiten zur Theorie von Tilings gehen auf Johannes Keppler (1580-1630) zurück (*Harmonice Mundi II*, 1619), und einige der dazu gehörenden Probleme sind bis heute nicht voll erforscht [50].

In diesem Kapitel werden die Archimedischen Gitter vorgestellt. Wegen ihrer endlichen Anzahl (11), bilden sie eine gut überschaubare Klasse grundlegender Gitter in zwei Dimensionen, aus denen sich weitere Gitter ableiten lassen. Plaziert man auf Punkten, an denen benachbarte Polygone zusammenstoßen, Spins, so erhält man ein Gitter von Spins, deren nächste Nachbarn auf benachbarten Polygonecken zu finden sind. Fügt man diesem Bild eine antiferromagnetische Austauschwechselwirkung hinzu, hat man eine Reihe von zweidimensionalen HAFM mit unterschiedlichen Koordinationszahlen und Topologien. Besitzen einige der regulären Polygone eine ungerade Anzahl von Ecken (Dreiecke), so erhält man geometrisch frustrierte Gitter.

Allen Systemen ist jedoch gemeinsam, daß alle Gitterplätze (Spins) äquivalent sind, wodurch ihre Komplexität auf ein übersichtliches Maß beschränkt bleibt. Ein großer Teil, der auf diese Weise mehr oder weniger künstlich konstruierten Modelle, findet in der Natur eine Realisierung, die relativ gut durch den HAFM auf einem dieser Gitter oder einer nur wenig modifizierten Form beschrieben wird.

Bild 4.1 zeigt die 11 möglichen uniformen Gitter. Die durch Punkte getrennten Zahlen n_i in der Bezeichnung $n_1.n_2.n_3 \dots n_r$ geben die Anzahl der Ecken der r Polygone an, die an einem Gitterpunkt angrenzen. Wenn die Bezeichnung nicht eindeutig ist, wird die lexikographisch erste ausgewählt (z.B. 4.8.8 statt 8.4.8 oder 8.8.4). Außerdem können Folgen gleicher Polygone durch Potenzschreibweise abgekürzt werden, so schreibt man zum Beispiel 3^6 für das Dreiecksgitter oder 4.8^2 für das Gitter 4.8.8.

Der innere Winkel eines Polygons mit n Ecken ist $(n-2)\pi/n$. Somit müssen r aneinander liegende n_i-Ecke folgender Bedingung genügen

$$\sum_{i=1}^{r} \frac{n_i - 2}{n_i} = 2, \tag{4.2}$$

damit die um den Gitterpunkt liegenden Polygone einen Vollkreis abdecken. Da der innere Winkel eines Polygons immer kleiner als π ist, müssen wenigstens drei Polygone ($r \geq 3$) aneinanderstoßen und mit $n_i \geq 3$ ist r maximal 6. Es gibt nur 17 Möglichkeiten von Zahlentupeln $(n_1, n_2, \dots n_r)$, die Gleichung 4.2 erfüllen. Daraus folgen zusammen mit verschiedenen Reihenfolgen der n_i wiederum 21 mögliche Anordnungen von regulären Polygonen mit einem gemeinsamen Eckpunkt. Will man mit solchen Anordnungen die gesamte Ebene füllen und sollen zusätzlich alle Ecken vom gleichen Typ sein, bleiben dann genau elf mögliche Realisierungen, die in Abbildung 4.1 aufgeführt sind. Davon bestehen die ersten drei Varianten der Tilings (T1…T3) aus nur einer Art von Polygonen.

In Tabelle 4.1 sind einige geometrischen Eigenschaften der 11 archimedischen Tilings angegeben. Gitter, die in der Literatur bisher keine Namen erhalten haben, sind entsprechend der Notation mit großen Buchstaben (T: $n = 3$ triangle, S: $n = 4$ square, H: $n = 6$ hexagon, O: $n = 8$ octagon und D: $n = 12$ dodecagon) abgekürzt. In der vorletzten Spalte ist den Gittern

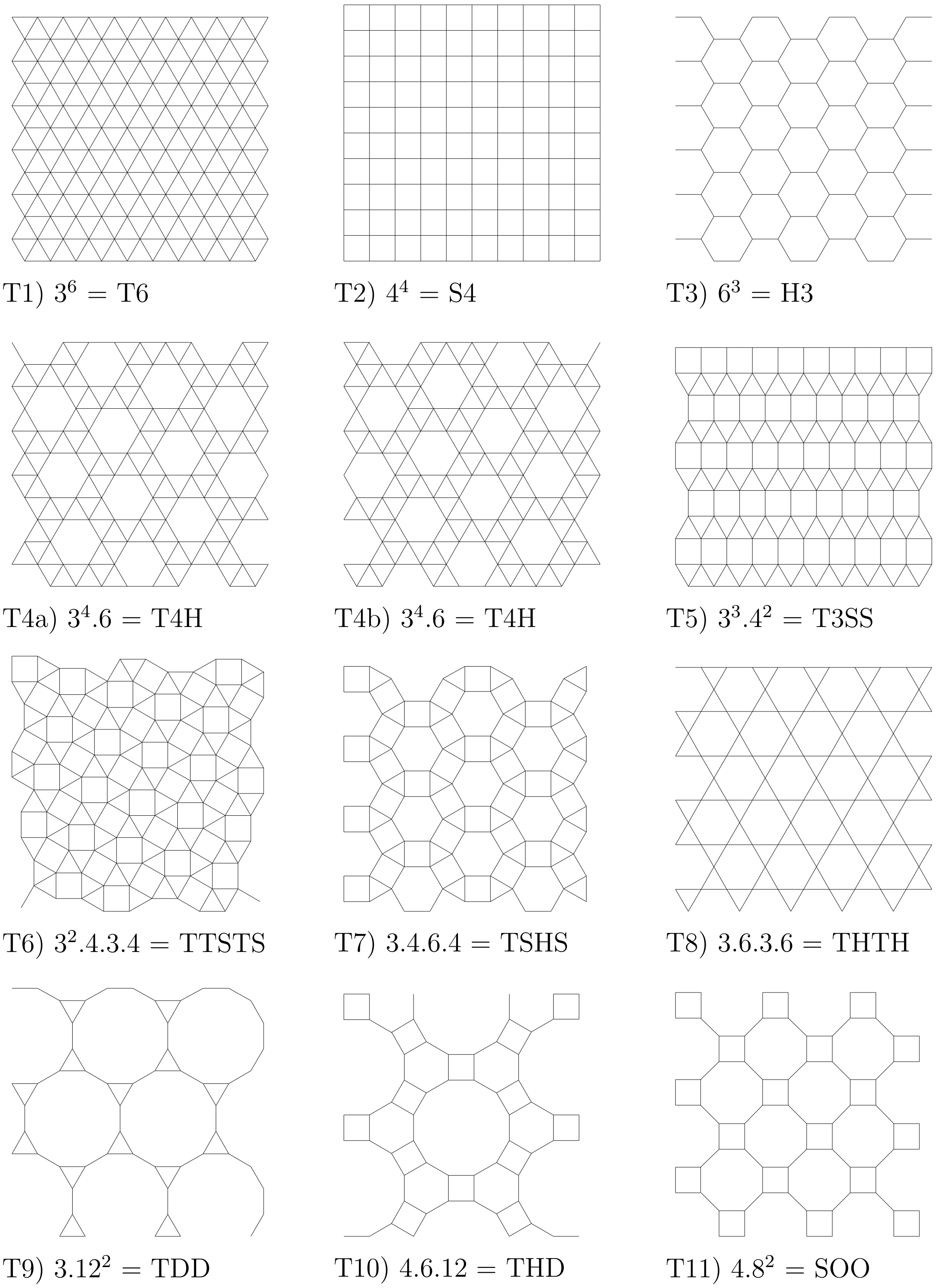


Abbildung 4.1: Die möglichen archimedischen Tilings T1…T11. Die mathematische Bezeichnung erfolgt nach der Anzahl der Ecken der regulären Polygone, die um einem gemeinsamen Eckpunkt liegen.

Tabelle 4.1: Geometrische Eigenschaften der 11 archimedischen Tilings. *nn* ist die Anzahl der nächsten Nachbarn jedes Gitterplatzes (auch Koordinationszahl z genannt), $2nn$ ist die Zahl der übernächsten Nachbarn jedes Gitterplatzes, V ist das Volumen der Einheitszelle, N/N_0 ist die Anzahl der Teilchen (Spins) je Einheitszelle und *Sym* ist die Symmetrie des Gitters (Kurzform der internationalen Raumgruppen, p=primitiv, c=centered, m=mirror, 6=6-zählige Hauptachse).

Nr.	Notation	nn	2nn	V	N/N$_0$	Sym	Namen
1	3^6	6	12	0.866025	1	p6m	T6, Dreiecksgitter
2	4^4	4	8	1.000000	1	p4m	S4, Quadratgitter
3	6^3	3	6	2.598076	2	p6m	H3, Honigwabengitter
4	$3^4.6$	5	9	6.062178	6	p6	T4H, Maple-Leaf
5	$3^3.4^2$	5	10	1.866025	2	cmm	T3SS, Trellis
6	$3^2.4.3.4$	5	10	3.732051	4	p4g	TTSTS, Shastry-Sutherland
7	3.4.6.4	4	8	6.464102	6	p6m	TSHS
8	3.6.3.6	4	8	3.464102	3	p6m	THTH, Kagomé
9	3.12^2	3	4	12.062178	6	p6m	TDD
10	4.6.12	3	5	19.392305	12	p6m	SHD
11	4.8^2	3	5	5.828427	4	p4m	SOO, CaVO

eine der 17 in zwei Dimensionen auftretenden Raumgruppen [55] (auch Ornamentgruppen [56]) zugeordnet. Mit Hilfe der Symmetrien läßt sich der Hilbertraum für die Berechnung der Eigenzustände des Heisenbergmodells zum Teil erheblich reduzieren. Durch die Translationssymmetrie erreicht man eine Reduzierung um den Faktor N_0 (Anzahl der Einheitszellen). Durch zusätzliche Punktsymmetrien wird der Hilbertraum weiter reduziert. Beispielsweise besitzt das Quadratgitter $p4m$-Symmetrie. Somit reduziert sich dessen Basisraum durch Raumsymmetrien um maximal $N_0 \cdot 4 \cdot 2 = 8N_0$. Für Randbedingungen, die die $p4m$-Symmetrie brechen (siehe Anhang D.3), oder angeregte Zustände ohne volle Raumsymmetrie kann der Hilbertraum teilweise nur um den Faktor N_0 reduziert werden.

Die archimedischen Gitter zeichnen sich durch ihre Gleichförmigkeit aus, das heißt, das Gitter erscheint von jedem Gitterpunkt aus betrachtet gleich. Sie unterscheiden sich jedoch untereinander durch die Zahl der nächsten Nachbarn (3 bis 6) und durch unterschiedlich starke Frustration. Die Stärke der Frustration wird hier der Idee von [60] folgend, durch die Energie des (klassischen) kontinuierlichen Spinmodelles auf den entsprechenden Gittern definiert. Unfrustrierte Gitter (Nr. 2, 3, 10, 11) haben die minimale Energie von $E_0/N_{nn} = -1$ (N_{nn} ist die Zahl der Bindungen zwischen nächsten Nachbarn, E/N_{nn} ist damit die Energie pro Bindung). Mit zunehmender Frustration können die einzelnen Bindungspaare nicht mehr ihre Bindung befriedigen. Maximale Frustration findet man mit $E_0/N_{nn} = -0.5$ beim Dreiecksgitter (Nr.1) und Kagomé-Gitter (Nr.8). In Bild 4.2 werden die archimedischen Gitter in einen von Koordinationszahl N_{nn} und Frustration aufgespannten Parameterraum einsortiert. Kleine Nachbarzahl N_{nn} und hohe Frustration fördern Fluktuationen und damit magnetische Unordnung. Ungeordnete Gitter sollte man daher in der linken oberen Ecke finden. In der gegenüberliegenden rechten unteren Ecke sollten demnach magnetisch geordnete Gitter zu finden sein.

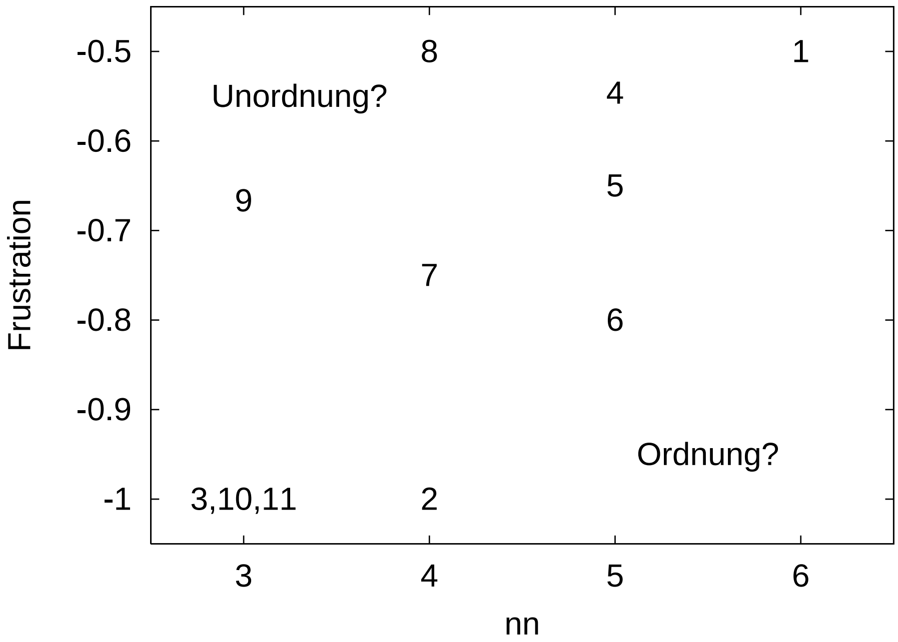


Abbildung 4.2: Durch die archimedischen Tilings aufgespannter Parameterraum aus Frustration und Koordinationszahl *nn* (Zahl der nächsten Nachbarn). Die Frustration wird hier definiert durch die Energie pro Bindung des klassischen Grundzustandes.

4.2.1 Verwandtschaften

Betrachtet man die Kanten der Polygone als Bindungen zwischen den Plätzen auf den Eckpunkten und läßt Modifikationen in der Stärke einzelner Bindungen zu ($J' = 0 \dots 1$), so kann man abgesehen von einigen Verzerrungen einige der Gitter ineinander umwandeln[3]. Die dadurch entstehenden Verwandtschaftsverhältnisse sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Einige dieser Verwandschaftsverhältnisse zwischen den bekannteren Gittern (Dreiecksgitter, Quadratgitter, Honigwabengitter) sind schon relativ ausführlich untersucht worden, meist in Verbindung mit möglichen Phasenübergängen [88, 89, 98]. Andere Übergange werden später benutzt, um den Grundzustand des HAFM auf den Tilings besser einordnen zu können. Der Großteil der genauen Verhältnisse bleibt hier jedoch offen und kann Gegenstand zukünftiger Arbeiten sein. Meist werden solche Arbeiten dadurch stimuliert, daß interessante Materialien experimentell untersucht werden, die sich gut durch das Heisenbergmodell auf einem der Tilings oder auf verwandten Gittern gut beschreiben lassen (z.B. die magnetischen Phasen des organischen Supraleiters κ-(BEDT-TTF)$_2$X [89]).

In den Abbildungen 4.4 und 4.5 soll die Verwandtschaft einzelner Gitter genauer veranschaulicht werden. Dabei zeigt Abbildung 4.4 die Verwandtschaft zwischen Dreiecksgitter (links), Quadratgitter (Mitte) und Honigwabengitter (rechts). Vom Dreiecksgitter gelangt man direkt zum Quadratgitter, wenn man die gepunktet dargestellte Bindung J'' herausnimmt, beziehungs-

[3] Es ist auch möglich, durch Entfernen oder Zufügen von Gitterpunkten samt umgebender Bindungen Verwandtschaften zu erzeugen (verdünnte Gitter oder „depleted lattices“). Auf diese Art von Verwandtschaft wird hier nicht explizit eingegangen.

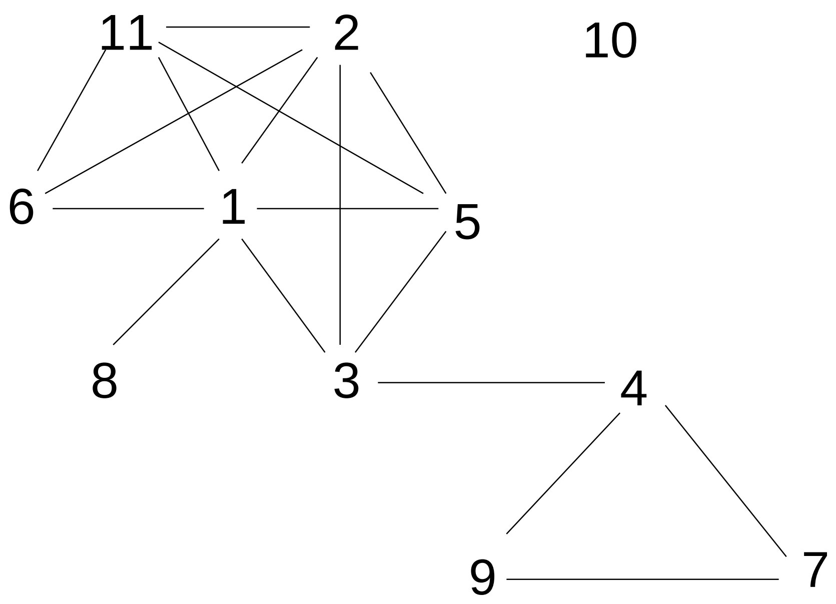


Abbildung 4.3: Verwandtschaftsverhältnisse (Linien) zwischen den Tilings (Zahlen). Verwandte Tilings entstehen auseinander durch Veränderung (Hinzufügen oder Entfernen) bestimmter Bindungen und Verzerrung des Gitters.

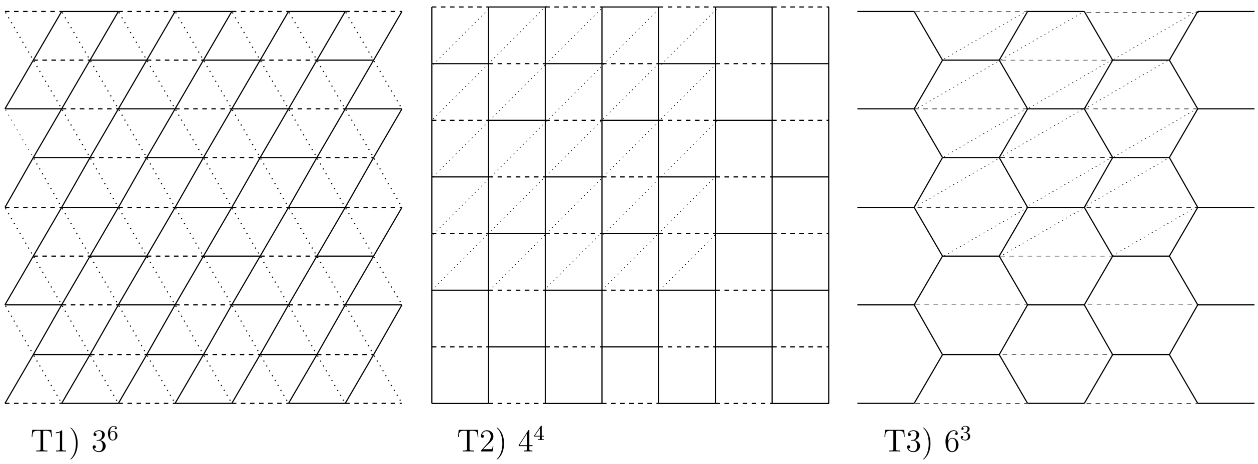
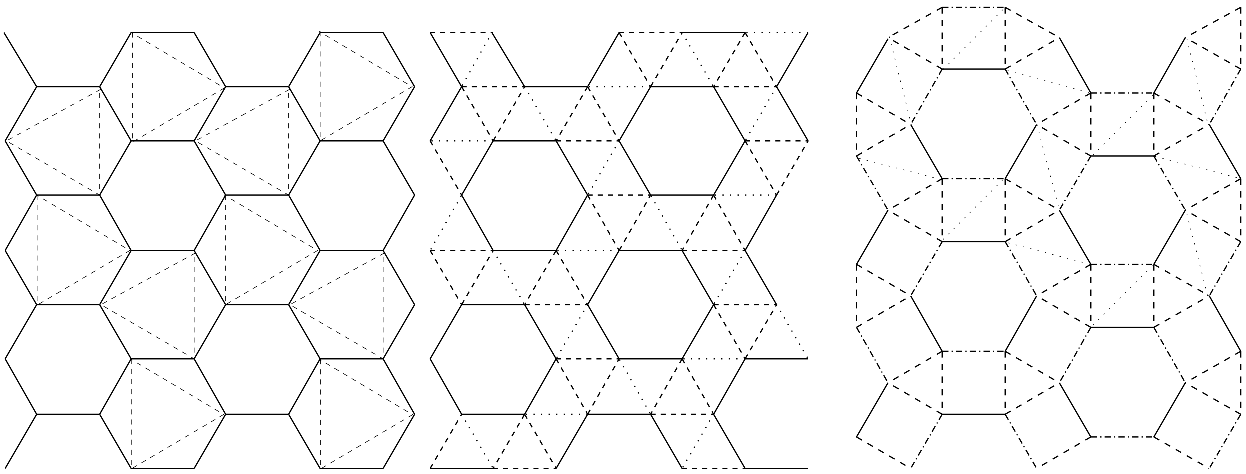


Abbildung 4.4: Verwandtschaft zwischen Dreiecksgitter (links), Quadratgitter (Mitte) und Honigwabengitter (rechts). Die Gitter können durch Variation einzelner Bindungen ineinander übergehen (siehe Text).



T3) 6^3 T4) $3^4.6$ T7) 3.4.6.4

Abbildung 4.5: Verwandtschaft zwischen Honigwabengitter (links), Maple-Leaf-Gitter (Mitte) und TSHS-Gitter (rechts). Die Gitter können durch Variation einzelner Bindungen ineinander übergehen (siehe Text).

weise $J'' = 0$ setzt. Bis auf eine geometrische Verzerrung, die für den Heisenbergoperator jedoch keine Rolle spielt, stimmt das Dreiecksgitter mit $J'' = 0$ dann mit dem Quadratgitter überein (gleiche Topologie). Im Quadratgitter (Mitte) sind die verschwindenen Bindungen J'' aus dem Dreiecksgitter teilweise dargestellt. Vom Quadratgitter gelangt man durch Entfernen der gestrichelt dargestellten Bindung J' und eine geometrische Verzerrung zum Honigwabengitter. Das Quadratgitter mit der variablen Bindung J' wird auch als staggered Modell [98] bezeichnet. Durch Entfernen der gestrichenen und gepunkteten Bindungen $J' = J'' = 0$ im Dreiecksgitter kommt man auch direkt zum Honigwabengitter. In Bild 4.4 rechts sind die entfernten Bindungen durch ihre teilweise Darstellung angedeutet.

Bild 4.5 zeigt die Verwandtschaft von Honigwabengitter (links), Maple-Leaf-Gitter (Mitte) und TSHS-Gitter (rechts). Ausgehend vom Maple-Leaf-Gitter in der Mitte von Abbildung 4.5 kommt man durch Entfernen der gepunkteten Bindung J_D zum rechts dargestellten TSHS-Gitter, wo die entfernten Bindungen nur angedeutet wurden. Entfernt man dann im TSHS-Gitter außerdem noch die durch abwechselnde Striche und Punkte dargestellten Bindungen, ensteht ein geometrisch verzerrtes TDD-Gitter (T9). Entfernt man im Maple-Leaf-Gitter dagegen die gestrichelt dargestellten Bindungen J_T, entsteht ein stark verzerrtes Honigwabengitter. Das Honigwabengitter zusammen mit den angedeuteten entfernten Bindungen J_T ist ganz links in Bild 4.5 dargestellt. Die verbleibenden geometrischen Verzerrungen spielen für das Heisenbergmodell wieder keine Rolle. Durch Entfernen beziehungsweise Hinzufügen von Bindungen kann man auf ähnliche Weise auch die anderen in Bild 4.3 dargestellten Verwandtschaften erklären.

4.3 Bravaisgitter

In den folgenden Kapiteln sollen zunächst die Bravaisgitter betrachtet werden. Bravaisgitter[4] werden diejenigen Gitter genannt, die einen Gitterplatz (Spin) je Einheitszelle besitzen. In einer Dimension gibt es ein Bravaisgitter, in zwei Dimensionen sind es fünf[5], und in drei Dimensionen sind es 14 Gitter [9]. Hier beschränke ich mich auf die Bravaisgitter in zwei Dimensionen, die zu den archimedischen Gittern gehören. Diese sind das Dreiecksgitter und das Quadratgitter. Sie dienen gleichzeitig als Lehrbeispiele, um die Zusammenhänge zwischen magnetischer Fernordnung, Symmetrien, Spektren und Finite-Size-Skalierung besser zu verstehen. Diese Gitter sind zum Teil bereits ausführlich in anderen Arbeiten behandelt worden, deshalb stellen die Kapitel mehr eine Zusammenfassung von bereits Bekanntem dar, was aber durch zusätzliche Ergebnisse ergänzt werden soll.

Der Grundzustand des $s = 1/2$-Antiferromagneten auf dem Quadrat- und Dreiecksgitter ist magnetisch ferngeordnet. Dieses Ergebnis wird durch zahlreiche Studien gestützt. Dennoch ist bisher kein exakter Beweis für die Fernordnung gefunden worden, so daß diese Gitter immer noch Gegenstand aktueller Forschungen sind.

4.3.1 Der HAFM auf dem quadratischen Gitter

Der Grundzustand des klassischen AFM ist der Néel-Zustand. Er bricht die Symmetrie des quadratischen Gitters. Das magnetische Gitter enthält zwei Arten von Gitterplätzen (A und B), die im Néel-Zustand jeweils mit Up- und Down-Spins besetzt sind. Die magnetische Einheitszelle ist dann doppelt so groß wie die geometrische Einheitszelle des quadratischen Gitters. Damit muß die Brillouin-Zone für das AB-Gitter gegenüber der Brillouin-Zone des quadratischen Gitters halbiert werden. Abbildung 4.6 zeigt sowohl die Brillouin-Zone des quadratischen Gitters als auch die des magnetischen Gitters. Wegen der Halbierung der Brillouin-Zone fallen die Punkte $Q_0 = (0, 0)$ und $Q_1 = (\pi, \pi)$ zusammen. Der $s = 1/2$ - HAFM ordnet sich bei $T = 0$ wie im klassischen Fall. Wie bereits erwähnt, verbietet für $T > 0$ das Mermin-Wagner-Theorem [51] ferromagnetische oder antiferromagnetische Ordnung für den HAFM auf dem Quadratgitter. Im folgenden beziehe ich mich jedoch immer auf den Fall $T = 0$.

Anders als im klassischen Fall bricht der quantenmechanische Grundzustand auf endlichen Gitterausschnitten mit periodischen Randbedingungen nicht die Symmetrie des Hamiltonoperators und besitzt demzufolge keine endliche Magnetisierung. Wegen des Lieb-Mattis-Theorems [16] hat der Grundzustand des HAFM auf einem bipartiten Gitter die Quantenzahl $S = |S_A| - |S_B| = 0$. Der Grundzustand für endliche Systeme ist ein rotationsinvarianter, nichtentarteter Singulett-Zustand (keine Symmetriebrechung des Hamiltonoperators).

Trägt man wie im Bild 4.7 für endliche Systeme die Energie E der Eigenzustände über $S(S+1)$ auf, so bemerkt man eine klare Separation der niedrigsten Energien von den höheren (siehe

[4] Eine exakte Definition für Bravais-Gitter gibt es nicht [54].

[5] Die fünf zweidimensionalen Bravaisgitter sind das Quadratgitter ($\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$, $\alpha = 90°$), zwei Rechteckgitter (primitiv und zentriert, $\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{a}_2$, $\alpha = 90°$), das Dreiecksgitter (hexagonal, $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$, $\alpha = 120°$) und das „schiefe“ Gitter (engl.: oblique, $a_1 \neq a_2$, $\alpha \neq \{90°, 120°\}$).

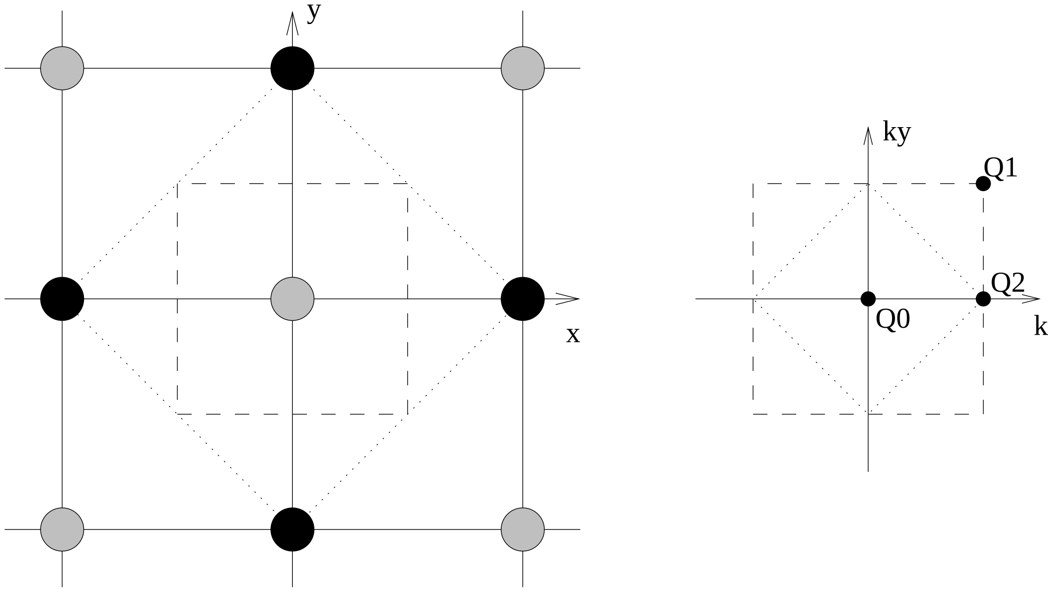


Abbildung 4.6: Wigner-Seitz-Zelle (links) und Brillouin-Zone (rechts) für das quadratische Gitter (gestrichelte Linie) und das der Néel-Ordnung zugrunde liegende AB-Gitter. Im klassischen Grundzustand zerfällt das quadratische Gitter in zwei Untergitter (graue und schwarze Kreise) und die zugehörige Brillouin-Zone halbiert sich (gepunktete Linie).

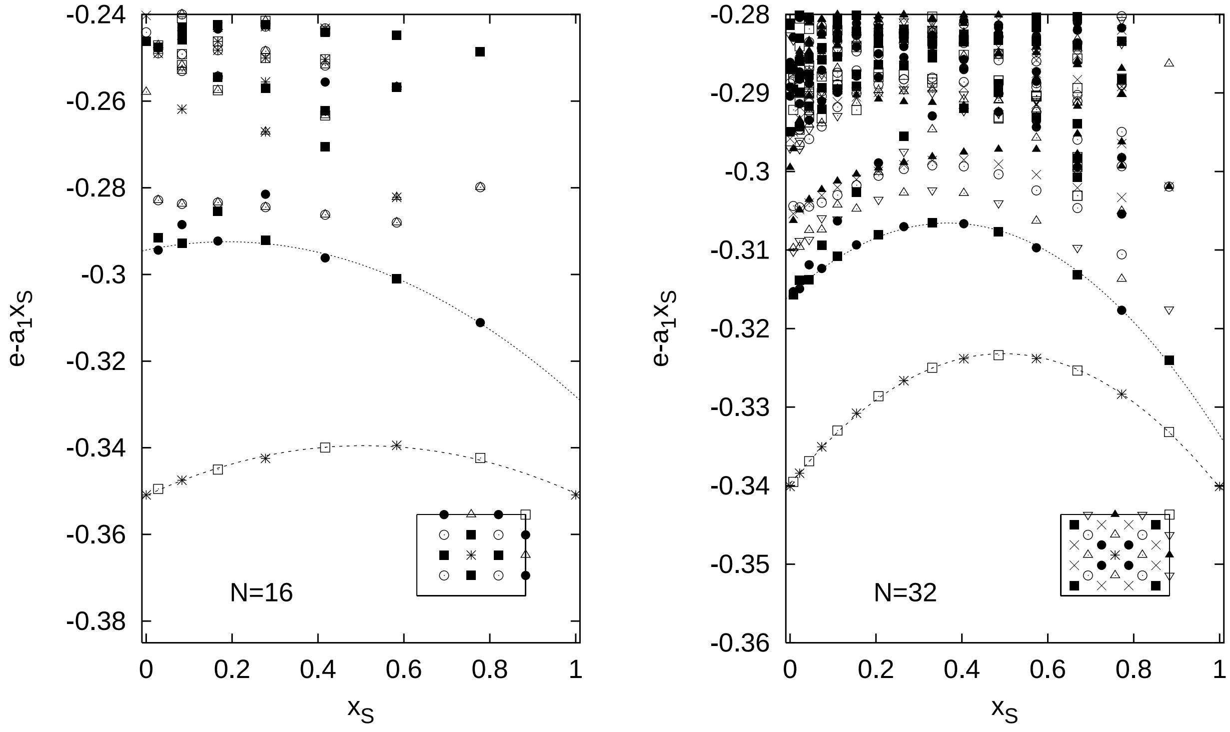


Abbildung 4.7: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen quadratischen Gittern. Zur besseren Übersicht wurde a_1X_S subtrahiert (siehe Anhang C.2).

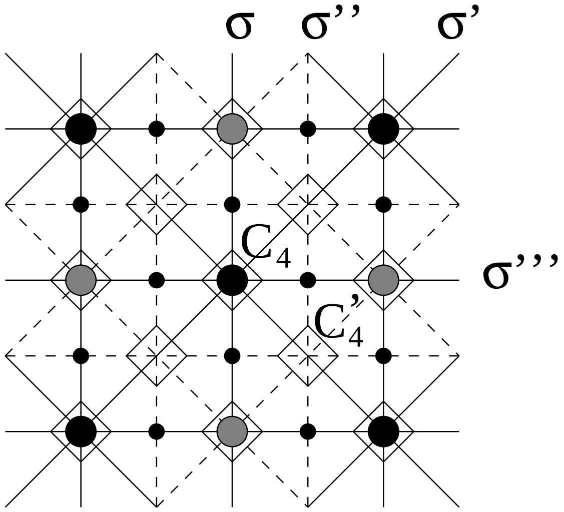


Abbildung 4.8: Punktsymmetrien des Quadratgitters. Die größeren Kreise markieren die up- bzw. down-Spins des Néel-Zustandes (grau und schwarz). Um $\pi/4$ gedrehte Quadrate markieren C_4-Rotationszentren (C_4 mit Spins als Zentren, C_4' zwischen 4 Spins). Die kleinen Punkte markieren Inversionszentren und die Geraden markieren Spiegelungen σ (σ - vertikal entlang einer Spinreihe, σ'' - vertikal zwischen den Spins, σ' - diagonale Spiegelachse, σ''' - horizontale Spiegelachse entlang einer Spinreihe). Die um 45° geneigten durch die Inversionszentren verlaufenden Gleitspiegelachsen sind nicht eingezeichnet.

Anhang C). Diese liegen annähernd auf einer Geraden. Mit zunehmender Systemgröße wird der Anstieg dieser Geraden immer flacher,

$$E(S) - E(0) \approx \frac{S(S+1)}{2IN} \quad \text{für} \quad S \lesssim \sqrt{N}. \tag{4.3}$$

Das legt den Schluß nahe, daß diese auf einer Geraden liegenden Zustände im thermodynamischen Grenzfall $N \to \infty$ entarten[6]. In diesem Fall ermöglicht die Überlagerung der entarteten Zustände die spontane Brechung der Symmetrie des Hamiltonoperators, was letztendlich in von Null verschiedenen Untergittermagnetisierungen $|\langle S_A^z\rangle| = |\langle S_B^z\rangle| > 0$ mit $\langle S_A^z\rangle + \langle S_B^z\rangle = 0$ resultiert und der Néel-Ordnung entspricht.

Alle diese im thermodynamischen Grenzfall entartenden Zustände, häufig auch quasientartete verbundene Zustände (engl.: QDJS, quasi degenerated joint states) genannt [84, 87], haben den Wellenvektor $\mathbf{k} = Q_0$ oder $\mathbf{k} = Q_1$. Q_0 und Q_1 müssen entarten, da sie in der halbierten Brillouin-Zone des Néel-geordneten Gitters zusammenfallen. Alle QDJS sind wie im klassischen Grundzustand invariant unter Rotation C_4. Zustände mit $S_z = 0$ und Q_0-Symmetrie sind gleichzeitig symmetrisch gegen Vertauschung von Up- und Down-Spins (Spiegelung der z-Komponente der Spins, $S^z \Leftrightarrow -S^z$, auch als Spininversion bezeichnet). Zustände mit $S_z = 0$ und Q_1-Symmetrie sind gleichzeitig antisymmetrisch gegen Vertauschung von Up- und Down-Spins.

[6]Die Entartung ist notwendig, da wegen der Vertauschungsrelation $[H, \mathbf{S}^2]_- = 0$ die Eigenvektoren durch die Quantenzahl S charakterisiert werden, der Néel-Zustand jedoch nicht durch ein bestimmtes S charakterisiert werden kann.

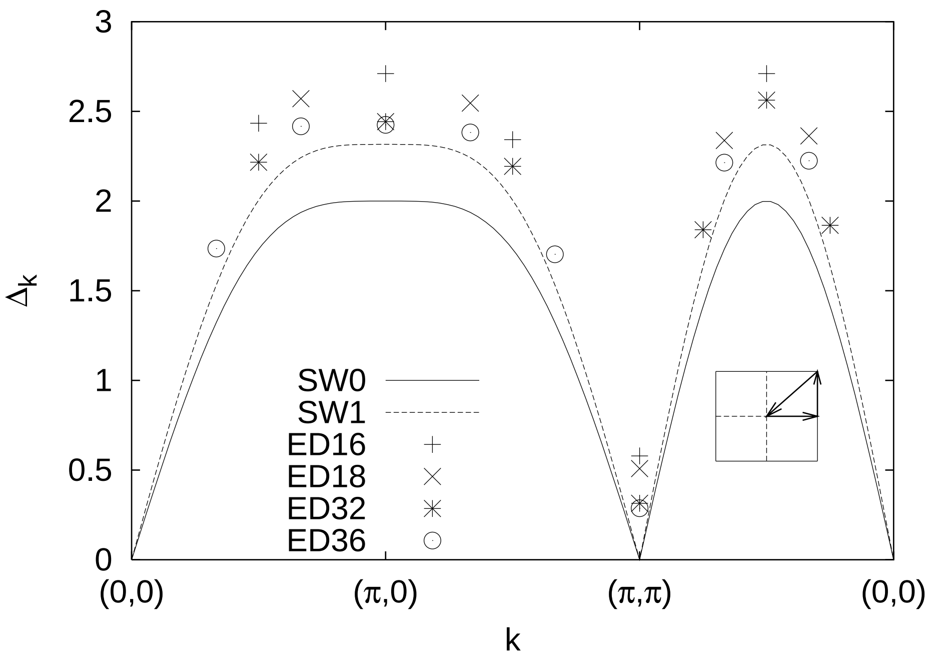


Abbildung 4.9: Energie der Ein-Magnon-Anregungen $\Delta_k = E_0(\mathbf{k}, S = 1) - E_0(S = 0)$ in Abhängigkeit von $\mathbf{k}$ (Dispersion). Die Kurven zeigen Resultate der linearen Spinwellentheorie (SW0) und höherer Ordnung (SW1) verglichen mit exakten Werten für endliche Gitter der Größen $N = 16$, 18, 32 und 36. Im rechten Teil der Abbildung ist der dargestellte Weg durch die Brillouin-Zone skizziert.

Die Eigenwerte zu den Punktsymmetrien (siehe Bild 4.8) lassen sich analog zu den Translationssymmetrien finden. So kann man die Elementarzelle bezüglich der Rotation C_4 als Quadranten des kartesischen Systems auffassen. Führt man die Rotation nicht um einen Spin, sondern um das Zentrum vier benachbarter Plätze aus (C_4'), so muß man das Gitter zweimal rotieren, um die magnetischen Untergitter in sich selbst zu überführen. Deshalb findet man zu dieser Symmetrie die Eigenwerte $\langle C_4' \rangle = e^0 = +1$ und $\langle C_4' \rangle = e^{i\pi} = -1$ für die kleinsten Energien $E(S)$, welche im thermodynamischen Grenzfall entarten müssen, um die Symmetrie des Néel-geordneten Zustandes zu liefern. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde in Abbildung 4.7 keine zusätzliche Unterscheidung nach Rotationssymmetrien der Zustände vorgenommen. Die in Bild 4.8 dargestellten Punktsymmetrien bilden zusammen mit den Translationen des Quadratgitters die $p4m$-Gruppe.

Mit dieser Vorstellung lassen sich die Symmetrieeigenwerte für die niedrigsten Energien $E(S)$ für magnetisch geordnete Systeme präzise voraussagen. Für gerade Werte $S_{max} - S = N/2 - S$ hat der Grundzustand $E_0(S)$ die Translationssymmetrie $k = (0, 0)$ und die Erwartungswerte zu allen Punktsymmetrien sind $+1$. Für ungerade Werte $S_{max} - S = N/2 - S$ hat der Grundzustand $E_0(S)$ die Translationssymmetrie $k = (\pi, \pi)$ und die Erwartungswerte $\langle C_4 \rangle = +1$, $\langle C_4' \rangle = -1$, $\langle \sigma \rangle = +1$, $\langle \sigma' \rangle = +1$ und $\langle \sigma'' \rangle = -1$. Für durch vier teilbare endliche Gittergrößen N folgt daraus, daß der Grundzustand E_0 immer symmetrisch ist, d.h. der Erwartungswert zu jeder Symmetrieoperation ist $+1$.

Bei genauer Betrachtung des Spektrums stellt man fest, daß auch die höheren Anregungen

Tabelle 4.2: Energie E_0 und Magnetisierung m für den Grundzustand und die erste magnetische Anregung E_1 des HAFM auf dem Quadratgitter für $N = 38$ und $N = 40$, die mit hohem Aufwand berechnet wurden. Neben den Randvektoren $((l_{11}, l_{12}), (l_{21}, l_{22}))$ in utlf-Form (Anhang E.1) ist die Symmetrie (Sym) der Gitterzellen in internationaler Notation angegeben. Die Daten für $N = 36$ findet man im Anhang in Tabelle E.1.

N	l_{11}	l_{12}	l_{21}	l_{22}	Sym	E_0	E_1	m^2
38	1	7	0	38	p2	-25.7607925	-25.4880015	0.20751801
40	2	6	0	20	p4	-27.09485025	-26.833227	0.20361937

klar separierte Kurven bilden. Diese lassen sich Ein-Magnon-Zuständen zuordnen. Um diesen Sachverhalt näher darzustellen, sollen die berechneten Anregungsenergien sowohl aus der Spinwellentheorie als auch aus der exakten Diagonalisierung in Abhängigkeit vom Impulsvektor $\mathbf{k}$ dargestellt werden. Abbildung 4.9 zeigt die Ein-Magnon-Energie Δ_k in Abhängigkeit von $\mathbf{k}$. Die obere Kurve zeigt den Verlauf der nächsthöheren Ordnung Spinwellentheorie und unterscheidet sich von der linearen Spinwellentheorie nur durch einen konstanten Vorfaktor von 1.15794742 [45].

Die Spinwellenanregungen lassen sich mit Hilfe der linearen Spinwellentheorie aus

$$H_{SW} = 4s \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2} (\alpha_{\mathbf{k}}^{+} \alpha_{\mathbf{k}} + 1/2) - 2Ns(s+1), \qquad \gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x + \cos k_y) \tag{4.4}$$

mit der Spinlänge $s = 1/2$ berechnen. $\alpha_{\mathbf{k}}$ ist der bosonische Vernichtungsoperator im Fourierraum. Im endlichen Gitter können Ein-Magnon-Anregungen $\alpha_k^{+}|0\rangle$ (dann ist $\langle \alpha_{\mathbf{k}}^{+} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = 1$ in Gleichung 4.4) mit bestimmten Wellenvektoren $\mathbf{k}$ wiedergefunden werden. Die entsprechenden Ein-Magnon-Anregungen für die exakten Daten ($N = 16, 18, 32, 36$) der endlichen Gitter wurden den Differenzen der Triplettanregungen zur Grundzustandsenergie $E(S = 1, \mathbf{k}) - E(S = 0, \mathbf{k_0})$ zugeordnet. Diese Definition entspricht der in [61, 8]. Für gerade $N/2$ (z.B.: $N = 16, 32, 36$) ist $\mathbf{k}_0 = (0, 0)$ der Grundzustandswellenvektor, für ungerade $N/2$ ist der Wellenvektor des Grundzustandes $\mathbf{k}_0 = (\pi, \pi)$ (z.B.: $N = 18$). Der Wellenvektor $\mathbf{k}$ der Ein-Magnon-Anregung bezieht sich immer auf den Wellenvektor des Grundzustandes, ist also als Differenz zu $\mathbf{k}_0$ definiert.

Die Anregung für $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ ist die tiefste magnetische Anregung und verschwindet im thermodynamischen Limes und sorgt damit für die Symmetriebrechung. Diese Anregung skaliert mit $1/N$. Die kleinste Anregung (Magnonanregung) mit $|\mathbf{k}| \approx 1/L = 1/\sqrt{N}$ skaliert mit $1/N^{1/2}$ (siehe auch Anhang C).

Finite-Size-Skalierung

Um ein möglichst vollständiges Bild zum Skalierungsverhalten (Finite-Size-Verhalten) des HAFM auf dem Quadratgitter zu liefern, wurden möglichst viele endliche Systeme mit verschiedensten Randbedingungen untersucht. In Bild 4.10 findet man die Grundzustandsenergie und die Energie der ersten Anregung in Abhängigkeit von der Systemgröße $N = L^2$. Für $N \leq 34$ wurden alle Gitterzellen benutzt, deren Randvektoren länger als zwei Gitterabstände $|l| > 2$ sind

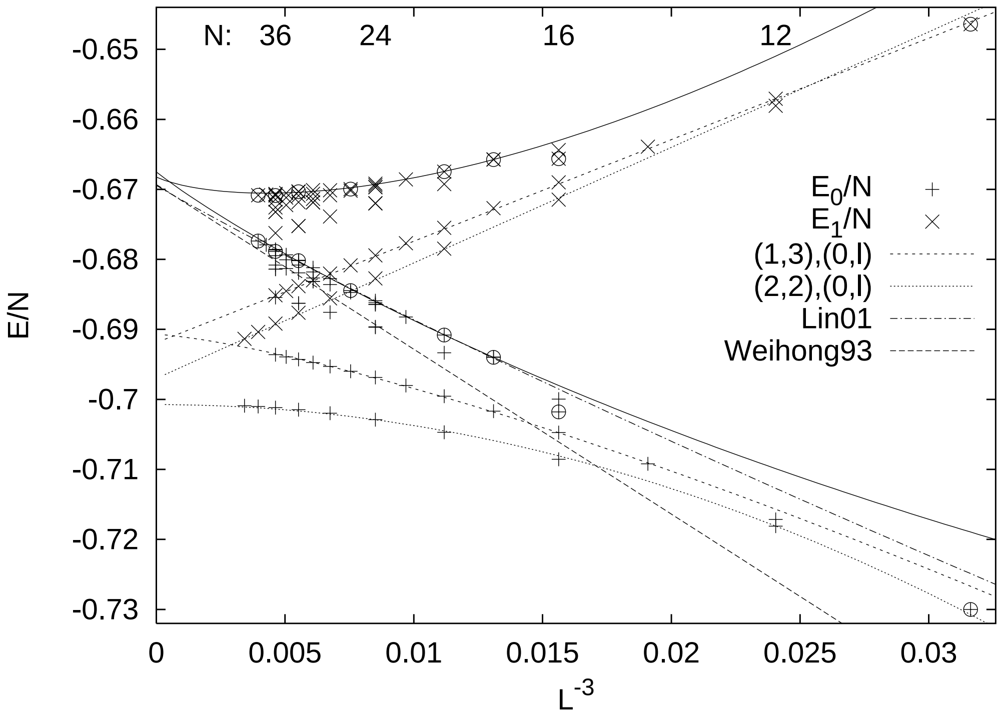


Abbildung 4.10: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(N)$ und der ersten magnetischen Anregung $E_1(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Systeme, bei denen nur ein Randvektor in der Länge wächst (z.B. $L = ((1, 3), (0, N)$ oder $L = ((2, 2), (0, N/2))$ und der andere damit zu kurz ist, haben deutlich tiefere Energien als Systeme mit „günstigeren“ Randbedingungen und skalieren wie eindimensionale Systeme (gestrichelte Kurven). Die Kreise markieren quadratische Gitterzellen mit p4- und p4m-Symmetrie. Die durchgezogene Linie ist ein Fit mit Gitterzellen, die günstige Randbedingungen besitzen. Zum Vergleich ist auch das Resultat der Spinwellentheorie dritter Ordnung (Weihong93) [45] dargestellt, das etwas kleinere Energien liefert. `Lin01` stammt aus einer Mischung von ED und QMC-Rechnungen [77].

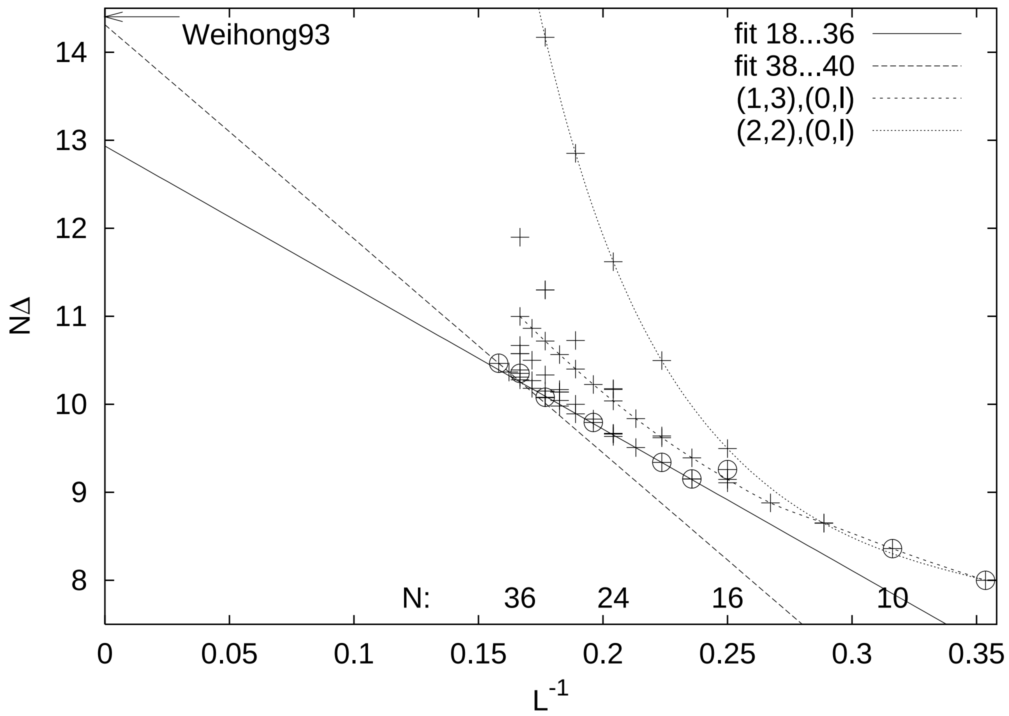


Abbildung 4.11: Produkt aus Systemgröße N und Energielücke (Gap) $\Delta = E_1(N) - E_0(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von L mit $N = L^2$. Die Kreise markieren quadratische Gitterzellen mit p4- und p4m-Symmetrie. Deutlich sichtbar ist, daß Systeme mit $N > 16$ anders skalieren als die kleineren Systeme. Ungünstigere Randbedingungen zeigen eine größere Energielücke Δ. Die durchgezogene Linie ist ein Fit mit Gitterzellen, die günstige Randbedingungen besitzen. `Weihong93` [45] ist ein aus der Spinwellentheorie dritter Ordnung abgeleites Resultat. Extrapoliert man nur die beiden größten Systeme linear, ist der extrapolierte Wert dichter an dem Ergebnis aus [45].

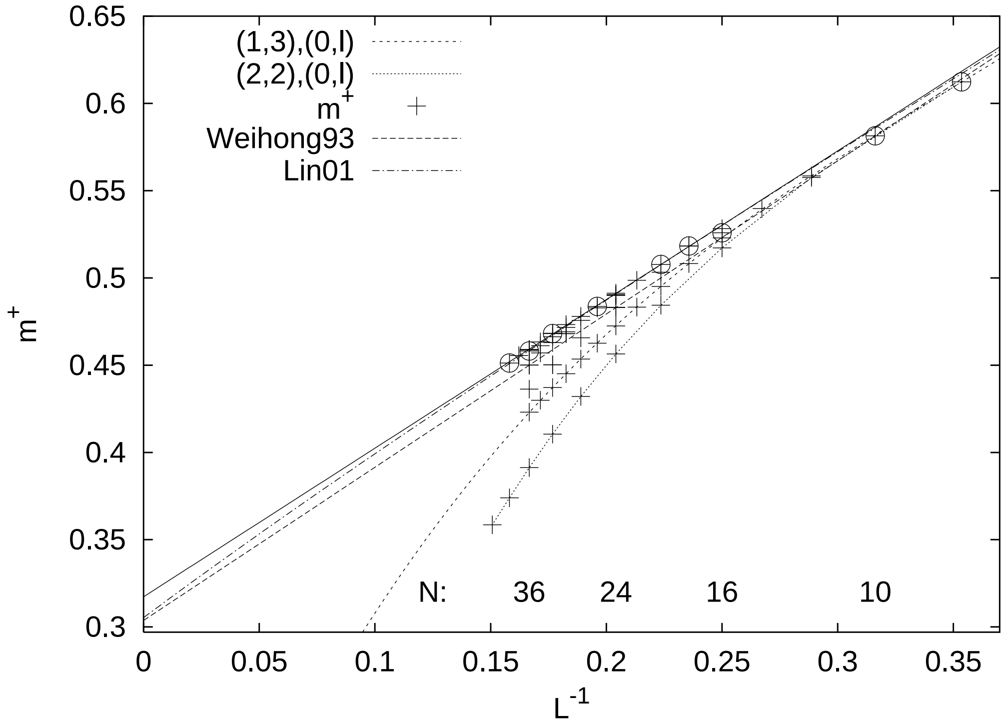


Abbildung 4.12: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Quadratgitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Kreise markieren quadratische Gitterzellen mit p4- und p4m-Symmetrie. Die durchgezogene Linie ist ein Fit mit Gitterzellen, die günstige Randbedingungen besitzen. Zum Vergleich sind auch die Resultate der Spinwellentheorie (Weihong93) [45] und der QMC (Lin01) [77] dargestellt, die etwas kleinere Magnetisierung liefern.

und die zur magnetischen Struktur des geordneten AFM passen ($l_x + l_y$ gerade). Für $N \geq 36$ konnten nur einige Systeme mit hoher Symmetrie diagonalisiert werden. Eine Vervollständigung dieser Rechnungen bis $N = 40$ ist auf Grund verbesserter Hard- und Software in naher Zukunft absehbar. In Tabelle 4.2 sind die bislang unpublizierten exakten Daten der größten berechneten Systeme $N = 38$ und $N = 40$ aufgeführt.

Zwei Dinge fallen in der Abbildung 4.10 sofort ins Auge. Erstens häufen sich für festes N die Energien mit verschiedenen Randbedingungen bei höheren Energien. Zweitens liegen zumindest die kleinsten Energien auf Kurven, die nicht wie die Masse der Punkte skalieren. Vergleicht man die Geometrie der Gitterzellen von den auf solchen Geraden liegenden Punkten, stellt man fest, daß sie durch die periodischen Randbedingungen einen in einer Dimension wachsendem Torus darstellen. Somit wird sofort verständlich, daß sie wie eindimensionale HAFM skalieren und für wachsende N immer mehr zu tieferen Energien hin abweichen. Für die beiden dünnsten Toren mit konstantem Durchmesser wurde das Skalierungsverhalten (Teilchenzahl oder Länge des Torus) durch gestrichelte Linien in Abbildung 4.10 hervorgehoben. Die Kurve zu der Randbedingung $L = ((2,2),(0,N/2))$ entspricht dem Skalierungsverhalten einer $S = 1$ Kette (Haldane-Kette). Die Kurve mit den Randbedingungen $L = ((1,3),(0,N))$ entspricht dem Skalierungsverhalten einer J_1-J_3-Kette, d.h. einer Kette mit nächsten und drittnächsten Nachbarwechselwirkung (siehe auch Anhang E.2).

Man kann sich leicht vorstellen, daß man mit wachsender Systemgröße N weitere Punkte auf analogen Kurven finden kann, die sich HAFM auf Toren mit größeren Durchmessern zuordnen lassen. Sie sollten ebenfalls zu niederen Energien hin abweichen. Außerdem wächst mit zunehmenden N auch die Anzahl der Toren mit ähnlichem Durchmesser, was die zunehmende Dichte der Punkte nach oben hin erklärt. Kleine Systeme $N \leq 16$ haben bezogen auf die Extrapolationskurve ebenfalls tendenziell zu niedrige Energien.

Für die Magnetisierung (Abbildung 4.12) zeigt sich ein ähnliches Bild. Wieder weichen Gitter mit ungünstigen Randbedingungen nach unten ab. Die Punkte, die einem Quadratgitter auf einem Torus mit festem Radius entsprechen, lassen sich demzufolge zum thermodynamischen Grenzfall $m = 0$ extrapolieren. Die einzelnen Werte liegen also unter der „Idealkurve“, so daß die Abweichungen vom Fit hier anders interpretiert werden, als beispielsweise in [73], wo die Magnetisierung der nichtquadratischen Gitter als zu groß interpretiert werden.

Nach dieser Argumentation sollten sich die Randbedingungen, die zu den höchsten Energien $E_0(N)$, b.z.w. $E_1(N)$ führen, besser zur Extrapolation $E(N \to \infty)$ des quadratischen Gitters eignen. In der Tat haben diese höchsten Energiewerte nur minimale Abweichungen von einer zugehörigen Extrapolationskurve (durchgezogene Linie in Abbildung 4.10). Es wird auch verständlich, daß wegen der nach oben zunehmenden Punktdichte, Extrapolationen über die Mittelwerte (Mittelung jeweils über alle Gitterzellen gleicher Größe N) nicht wesentlich schlechter sind. Ebenso sind Extrapolationen, bei denen nur quadratische Gitterzellen (Kreise in Abbildung 4.10) genutzt werden, nicht viel schlechter, da sie im oberen Häufungsbereich liegen. Jedoch sollte die Extrapolation mit weniger Datenpunkten dann mit einem größeren statistischen Fehler behaftet sein.

Die Energie eines zweidimensionalen HAFM skaliert nach [44] wie

$$\epsilon_0(L) = A_0^0 + A_3^0 L^{-3} + A_4^0 L^{-4} + ... \quad , \tag{4.5}$$

wobei $A_0^0 = \epsilon_0(\infty)$ der gesuchten Energie im thermodynamischen Limes entspricht. Benutzt man für die Extrapolation nur die höchsten Energien mit $N > 16$ und $N \leq 36$ findet man $A_0^0 = -0.6668(9)$, $A_3^0 = -3.47(43)$ und $A_4^0 = 5.95(155)$. Extrapoliert man die Energien für die erste magnetische Anregung E_1 auf die gleiche Weise, so erhält man für $A_0^0 = -0.6677(8)$. Folgt man der Annahme von [72], daß die Green-Funktions-Monte-Carlo-Methode [69] mit $E/N = -0.6692(1)$ [7] die besten Ergebnisse liefert, ist das Ergebnis deutlich besser als vorangehende Extrapolationen aus Daten [66, 67] von exakter Diagonalisierung mit $E/N = -0.672(1)$ bis $N =$ 26 Spins. Eine Übersicht über in anderen Arbeiten gefundene Grundzustandsenergien findet man beispielsweise in [71, 72]. Spinwellentheorie liefert eine Energie von $E/N = -2s^2 - 0.315895s - 0.012474 + 0.0000216(6)/s = -0.6704$, wobei die Abschätzung der Serie zu $E/N = -0.6693(2)$ gute Übereinstimmung mit den QMC-Resultaten liefert [45]. Auch neue Rechnungen mit DMRG (density-matrix renormalization group) mit Systemgrößen bis zu $N = 12^2$ liefern einen Wert in diesem Bereich von $E/N = -0.6692$ [63].

Der aus den Daten der exakten Diagonalisierung bestimmte Wert ändert sich bei Hinzunahme von $N = 38$ oder zusätzlich $N = 40$ (nur vollsymmetrisches System) ebenfalls in Richtung dieser Abschätzung ($E/N = -0.6685(6)$), so daß eine Konvergenz der Ergebnisse der verschiedenen Verfahren im Rahmen des Möglichen liegt. Eine Abschätzung der Genauigkeit der Extrapolation kann man bekommen, wenn auch die Energie der ersten Anregung E_1/N extrapoliert wird. Dabei weicht dieser Wert um etwa 0.1% zu niedrigeren Energien hin ab. Hinzunahme der Gitter bis $N = 40$ verringert die Energie auf $E_1/N = -0.6690(5)$, in guter Übereinstimmung mit den oben zitierten Werten. Benutzt man nur die zwei oder drei größten Systeme mit $N = 36, 38, 40$ ist die linear extrapolierte Energie mit $E_0/N = -0.670$ und $E_1/N = -0.672$ ebenfalls sehr dicht am Wert aus Spinwellentheorie dritter Ordnung.

Die magnetische Anregungslücke (auch Gap oder Spin-Gap, Abbildung 4.11) $\Delta_1 = E_1 - E_0$ sollte verschwinden

$$N\Delta_1(L) = D_4 + D_5 L^{-1} + D_6 L^{-2} + ... \quad . \tag{4.6}$$

Beim Gap zeigen die Energien für Systeme mit verschiedenen Randbedingungen die gleichen qualitativen Erscheinungen. Die „besten“ Randbedingungen liefern das kleinste Gap. Damit werden $D_4 = 12.93(4)$ und $D_5 = -16.08(21)$. Auch hier nähert man sich den aus der Spinwellentheorie [45] hergeleiteten Wert von $D_4 = 14.4$, wenn man die größeren Systeme $N > 36$ in die Extrapolation einbezieht. Lineare Extrapolation der Systeme $N = 38, 40$ liefert mit $D_4 = 14.3$ schon eine erstaunliche Übereinstimmung. Es bedarf weiterer Rechnungen um festzustellen, ob diese verbesserte Übereinstimmung von systematischer Natur ist.

Auch die Magnetisierung $m^+ = M^+/N$ (siehe auch Anhang A) mit

$$(M^+)^2 = \sum_{i,j=1}^{N} |\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle|, \tag{4.7}$$

dargestellt in Abbildung 4.12, läßt eine qualitative Einteilung der Gitterzellen nach oben genannten Gesichtspunkten zu. Die Extrapolation der numerischen Daten führt zu $m^+ = 0.3173(11)$ und liegt 5% über dem ersten Spinwellenresultat von 0.3034 [64]. Spinwellentheorie in höherer

[7] [70, 71] erhalten ebenfalls einen Wert von $E/N = -0.66923(13)$. Spätere ähnliche QMC-Rechnungen [75] liefern eine leicht niedrigere Grundzustandsenergie von $E/N = -0.669437(5)$ und eine Kombination von QMC und exakter Diagonalisierung [77] liefert $E/N = -0.66944(6)$.

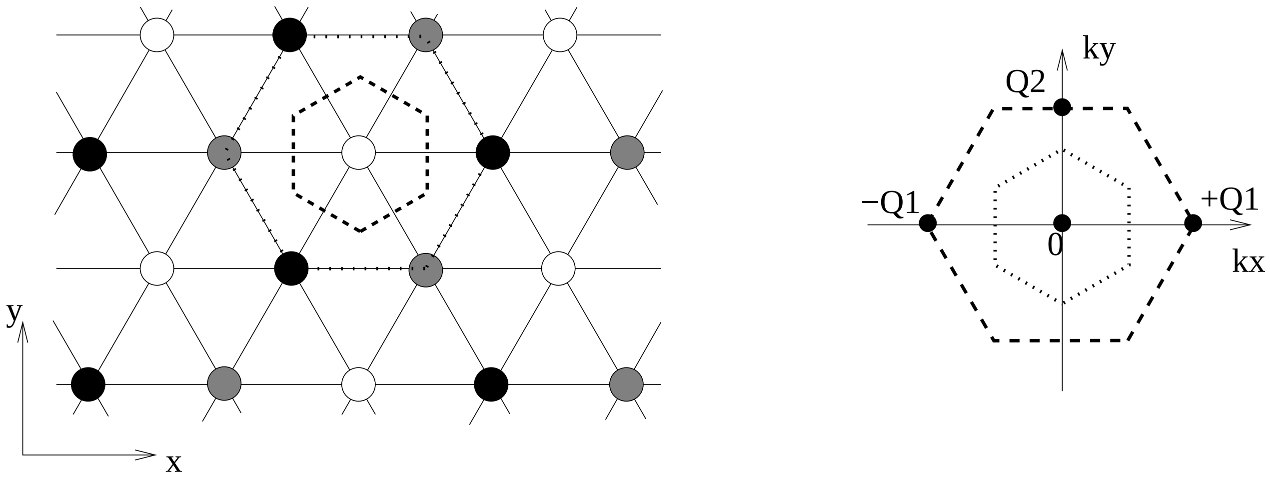


Abbildung 4.13: Wigner-Seitz-Zelle (links) und Brillouin-Zone (rechts) für das Dreiecks-Gitter (gestrichelte Linie) und das der Néel-Ordnung zugrunde liegende ABC-Gitter. Im klassischen Grundzustand zerfällt das Dreiecks-Gitter in drei Untergitter (weiße, graue und schwarze Kreise) und die zugehörige Brillouin-Zone drittelt sich.

Ordnung liefert eine etwas grössere Magnetisierung von $m = s - 0.1966019 + 0.0000866(25)/s^2 = 0.3037$ [45], die aber noch deutlich unterhalb des extrapolierten Wertes liegt. Eine Übersicht zu Ergebnissen anderer Arbeiten bis 1990 findet man in [71]. Die dort präsentierten Ergebnisse aus Monte-Carlo-Rechnungen liefern Magnetisierungen zwischen 0.285 [68] und 0.34 [69]. Neuere Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen (QMC) mit bis zu 12×12 Gitterplätzen liefern für die Magnetisierung einen Wert von $m = 0.3075(25)$ [73], Rechnungen mit bis zu 16×16 Plätzen liefern für die Magnetisierung einen Wert von $m = 0.3070(3)$ [75], und eine Kombination aus QMC (bis 8×8) und exakter Diagonalisierung liefert $m = 0.3055(5)$ [77]. Auch bei der Magnetisierung führt die lineare Extrapolation der drei größten Systeme $N = 36, 38, 40$ mit $m = 0.308(12)$ zu einer deutlich besseren Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Arbeiten.

4.3.2 Der HAFM auf dem Dreiecks-Gitter

Der $s = 1/2$ - Heisenberg-Antiferromagnet auf dem zweidimensionalen Dreiecksgitter wurde in den siebziger Jahren zuerst als ein Kandidat für einen ungeordneten Grundzustand vorgeschlagen (Anderson *et al.* [78, 79], RVB-Zustand). Die Unordnung sollte durch Frustration bewirkt werden, die auf dem Dreiecksgitter durch die Geometrie des Gitters mit jeweils drei zueinander benachbarten Spins zustande kommt. Diese Annahme konnte jedoch nicht bestätigt werden, dagegen zeigen verschiedene Arbeiten einen Néel-geordneten Grundzustand mit drei Untergittern [81, 62, 82, 84, 87, 90, 88]. Das Dreiecksgitter ist ein sehr typisches Beispiel für einen frustrierten HAFM.

Im klassischen Fall zerfällt das Gitter in drei magnetische Untergitter A, B und C. Die Spins verschiedener Untergitter ordnen sich in einer 120°-Struktur zueinander. Die magnetische Einheitszelle umfaßt dann drei geometrische Einheitszellen und die Brillouin-Zone ist nur ein Drittel der geometrischen Brillouin-Zone (Bild 4.13). Durch die Drittelung der geometrischen Brillouin-Zone fallen der Mittelpunkt $Q_0 = (0, 0)$ und die Eckpunkte $\pm Q_1 = \pm(4\pi/3, 0)$ der geometrischen

Brillouin-Zone in der magnetischen Brillouin-Zone zusammen. Jeweils drei der sechs Eckpunkte der Brillouin-Zone sind äquivalent, da sie durch einen reziproken Gittervektor verbunden sind. In Abbildung 4.14 sieht man deutlich die Separierung der niedrigsten Energien mit genau diesen Translationsquantenzahlen. Das ist ein Hinweis dafür, daß auch Quantenfluktuationen diese Ordnung nicht zerstören. Ein weiterer Hinweis für Fernordnung im $s = 1/2$ Fall ist die bemerkenswerte Güte der Spinwellentheorie für das Dreiecksgitter [86].

Auffällig ist der Knick im Verlauf der niedrigsten Energien $E(S)$ bei $S = Ns - N/3$ in den Abbildungen 4.14. Er läßt sich jedoch leicht verstehen, wenn man das Heisenbergmodell in zwei Teile aufteilt. Der erste Teil soll der Isingoperator sein (nur z-Komponenten), der zweite Teil ist dann der XY-Operator (x- und y-Komponenten). Mit dieser Aufteilung hat man den Heisenbergoperator in seinen klassischen und quantenmechanischen Anteil zerlegt. Zuerst soll der Grundzustand $E(S)$ des klassischen Anteils näher betrachtet werden. Bei maximaler Magnetisierung $S = N/2$ gibt es nur den Zustand mit allen Einzelspins up oder down. Zustände mit kleinerer Magnetisierung S erreicht man durch aufeinanderfolgendes Flippen von up- zu down-Spins. Den größten Energiegewinn erreicht man, wenn nur Spins geflippt werden, deren Nachbarn in dieselbe Richtung zeigen. Der erzielte Energiegewinn ist dann $3J$. Ist ein Drittel aller Spins geflippt worden, erhält man keinen Energiegewinn durch weiteres Flippen von Spins, da jeder zu flippende Spin drei up-Spins und drei down-Spins zum Nachbarn hat, so daß sich deren summierte Bindungsenergien aufheben. Für das Isingmodell kann der Grundzustand damit durch

$$E(S) = \begin{cases} -JN/4 & \text{für} \quad 0 \leq S < N/6 \\ -3JN/4 + 3JS & \text{für} \quad N/6 < S \leq N/2 \end{cases} \tag{4.8}$$

beschrieben werden.

Der zweite Teil des Hamiltonoperators, der die Quantenfluktuationen trägt, führt zu einer weiteren Absenkung der Energien. Die Absenkung ist um so größer, je mehr man sich vom Fall maximaler Magnetisierung $S = N/2$ entfernt. Damit hat man ein qualitatives Bild für den Knick in den Spektren aus Abbildung 4.14. Ähnliches Verhalten sollten auch Spektren für andere regelmäßige Gitterstrukturen zeigen, die frustrierende Bindungen haben und dessen Ising-Grundzustand $E(S)$ damit keine einfache Gerade darstellt.

Eine ausführliche Analyse der Symmetrien der Zustände mit den im jeweiligen Unterraum S niedrigsten Energien $E(S)$ wurde in [84, 87] für endliche Systeme bis $N \leq 36$ vorgenommen. Diese Zustände (QDJS) haben eine der folgenden Symmetrien [84, 86] (siehe Bild 4.15):

- Γ_1: $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0$, gerade unter Inversion [8], invariant unter C_{3v}-Drehung [9]
- Γ_2: $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0$, ungerade unter Inversion, invariant unter C_{3v}-Drehung
- Γ_3: $\mathbf{Q} = \pm\mathbf{Q}_1 = \pm(4\pi/3, 0)$.

Invarianz für C_{3v}-Drehung findet man dabei nur für die C_{6v}-symmetrischen Gitterzellen ($N = 9$, 12, 21, 27, 36). Nur die Gitterzellen mit $N = 9$, 12, 27, 36 haben die volle Symmetrie (p6m)

[8] In [86] wird Inversion als Spininversion übersetzt. In der Originalarbeit [84] ist jedoch die Inversion des Gitters am C_6-Zentrum gemeint.

[9] Das C_{3v}-Zentrum bezieht sich auf die Symmetrie des klassischen Grundzustandes und ist identisch mit dem C_{6v}-Zentrum des Dreiecksgitters (C_{6v}^2-Drehung).

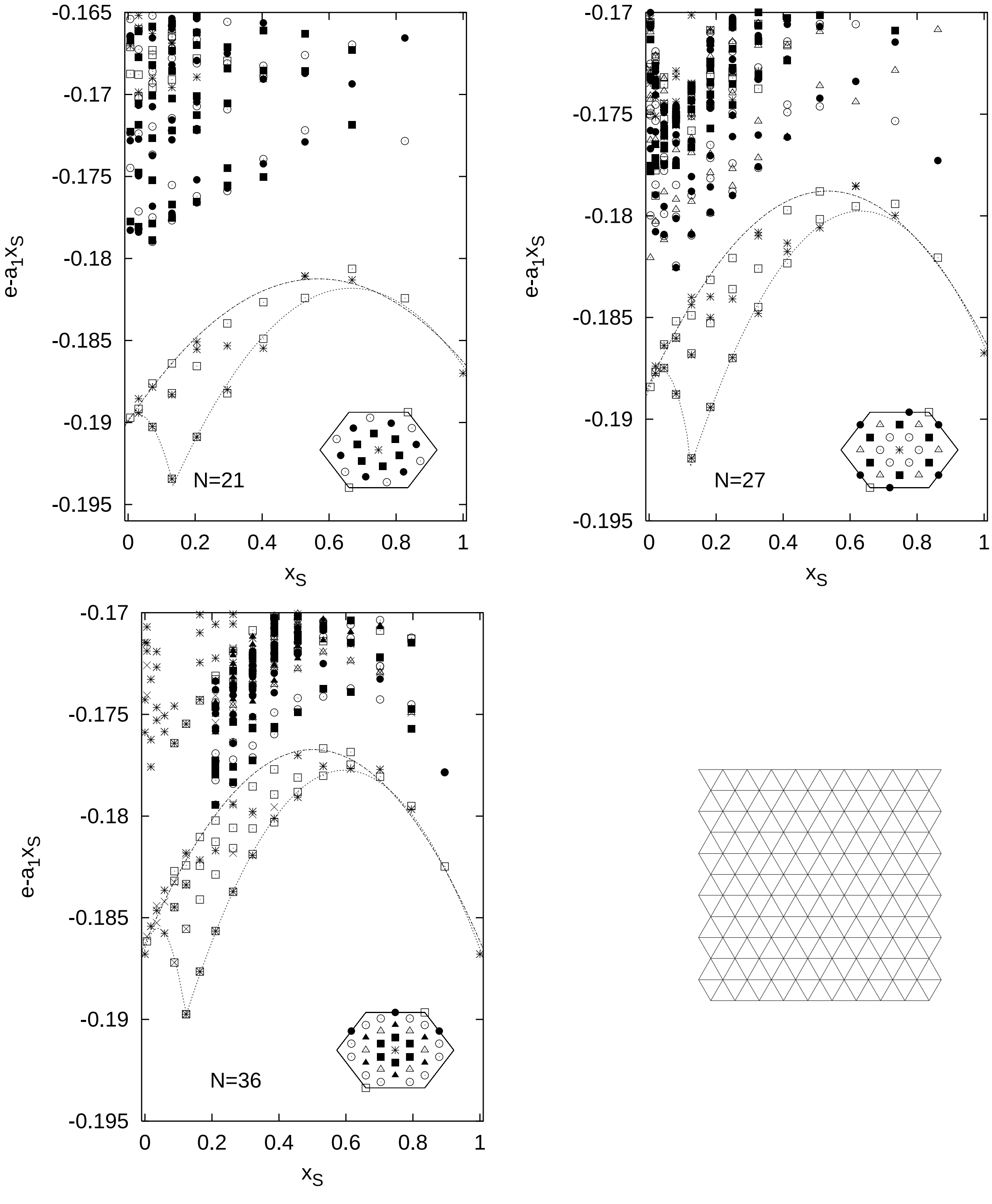


Abbildung 4.14: Energie E der niedrigsten Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) und für verschiedene Q-Punkte für den HAFM auf endlichen Dreiecksgittern. Zur besseren Übersicht wurde a_1X_S subtrahiert (siehe Anhang C.2). Für $N = 36$ sind für niedrige Quantenzahlen S die Anregungen mit $Q \neq Q_0$ und $Q \neq \pm Q_1$ nicht eingetragen. Die Ordnung der Energien der QDJSs (siehe Text) wird dadurch deutlicher sichtbar.

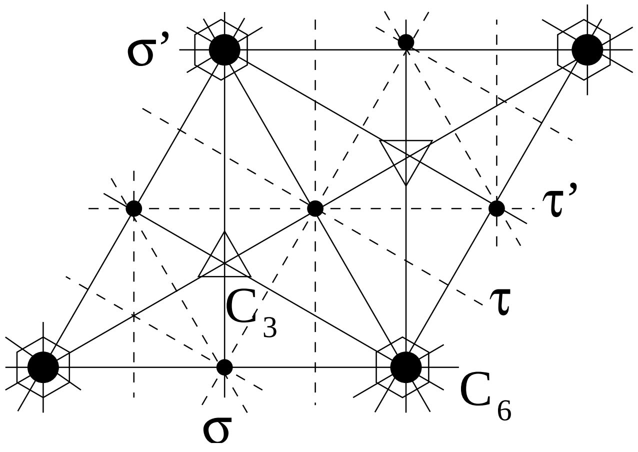


Abbildung 4.15: Symmetrien des Dreiecksgitters. Die größeren Kreise markieren die Position der Spins. Sie sind gleichzeitig die C_6-Symmetriezentren. Die Dreiecke markieren die C_3-Symmetriezentren zwischen den Spins. Die kleinen Punkte markieren Inversionszentren, die durchgezogenen Geraden markieren axiale Spiegelungen σ und die gestrichelten Linien die Gleitspiegelachsen τ.

des Dreiecksgitters, $N = 21$ hat wegen der fehlenden Spiegelebenen nur p6-Symmetrie. Γ_3 findet man nur für Gitterzellen mit N als Vielfaches von 3.

Finite-Size-Skalierung

Abbildung 4.16 zeigt das Skalierungsverhalten der Energie in Abhängigkeit von L^{-3} mit $N = L^2$ für endliche Gitterzellen. Wie schon in [84] erwähnt, ist eine Skalierung nach $E/N = a_0 + a_3 L^{-3}$ nicht sofort ersichtlich. Insbesondere für kleinere Gitterzellen $N < 21$ gibt es stärkere Korrekturen. Berechnet man jedoch auch die Energien nicht C_6-symmetrischer Zellen, zeigt sich ein ähnliches Bild, wie beim HAFM auf dem Quadratgitter. Ist ein Randvektor „zu kurz“, so skaliert das System wie ein in einer Richtung wachsender Torus. Das entspricht dem in Abschnitt 20 (Finite-Size-Skalierung des HAFM auf dem Quadratgitter) beschriebenen Verhalten. Deshalb ist insbesondere die Abweichung für $N < 21$ leichter verständlich, da diese Systeme immer einen Randvektor mit kurzer Länge l besitzen. Gleichzeitig liefert das auch eine Erklärung, warum die Energie keine offensichtliche $N^{-3/2}$-Abhängigkeit [87] zeigt. In Abbildung 4.16 sind diese Abweichungen durch gestrichelte Linien besonders hervorgehoben. Für die Extrapolation $N \to \infty$ wurden Werte mit $N < 21$ daher nicht verwendet. Für die geraden und ungeraden Zellengrößen ergeben sich leicht abweichende Werte, so daß die extrapolierte Grundzustandsenergie des Dreiecksgitters zu $E_0/N = -0.554(2)$ abgeschätzt werden kann. Dieser Wert ist kleiner als der in [87] angegebene Wert aus Daten exakter Diagonalisierung von -0.5445, wo jedoch auch die kleineren Systeme (mit Mittelung über QDJS-Zustände, Extrapolation mittels C.1 zu $S = 0$ für ungerade N und a_3 über SWT festgelegt) eingingen. Auch der Monte-Carlo-Wert [90] ist mit -0.5458(1) etwas höher[10]. Die neueren Abschätzungen der Grundzustandsenergie des HAFM auf dem Dreiecksgitter differieren noch um etwa 2% voneinander und kommen dem exakten Wert

[10] Um das Vorzeichenproblem zu beheben, daß für Quanten-Monte-Carlo-Methoden an frustrierten Spinsystemen auftritt, müssen Näherungen gemacht werden. So kann man den Hamiltonoperator durch einen neu-

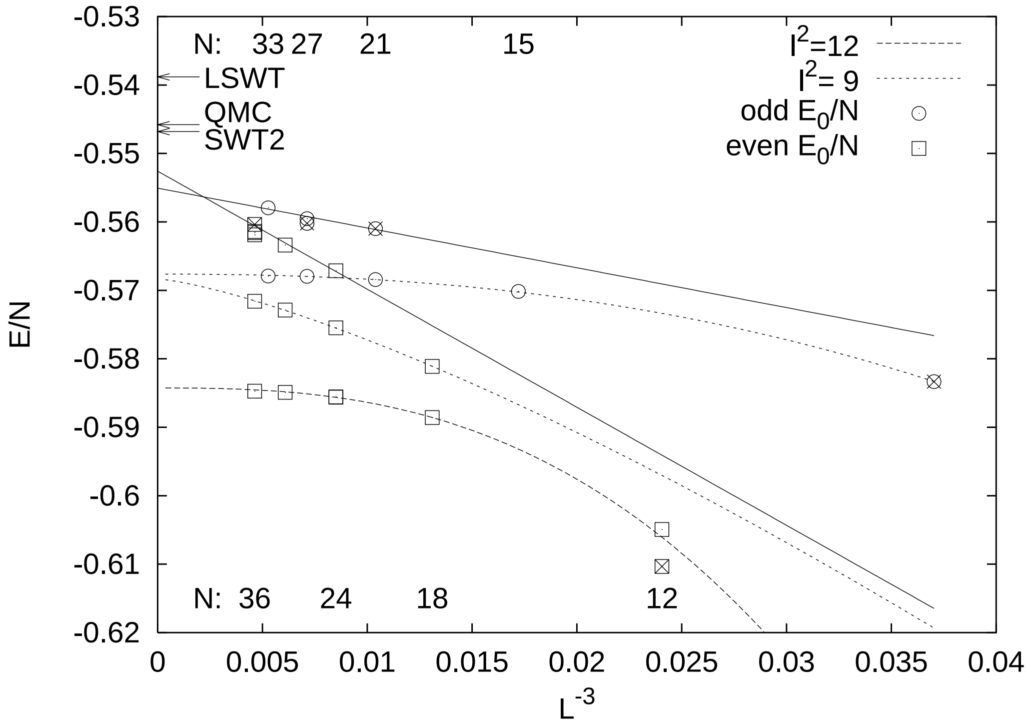


Abbildung 4.16: Energie pro Platz des Grundzustandes E_0/N des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$ (even: N gerade, odd: N ungerade). Randvektoren vom selben Typ (kurze Seitenlänge l mit $l^2 = 9$ oder $l^2 = 12$, siehe Anhang E.3) haben deutlich tiefere Energien als Systeme mit „günstigeren“ Randbedingungen und skalieren nicht mit L^{-3} (gestrichelte Kurven). Die durchgezogenen Linien sind lineare Extrapolationen „geeigneter“ Gitterzellen (Anhang E.2). Die Kreuze markieren Gitterzellen mit p6- und p6m-Symmetrie. Zum Vergleich sind Ergebnisse linearer Spinwellentheorie (LSWT), Spinwellentheorie zweiter Ordnung (SWT2) und der Quanten-Monte-Carlo-Methode (QMC) eingetragen.

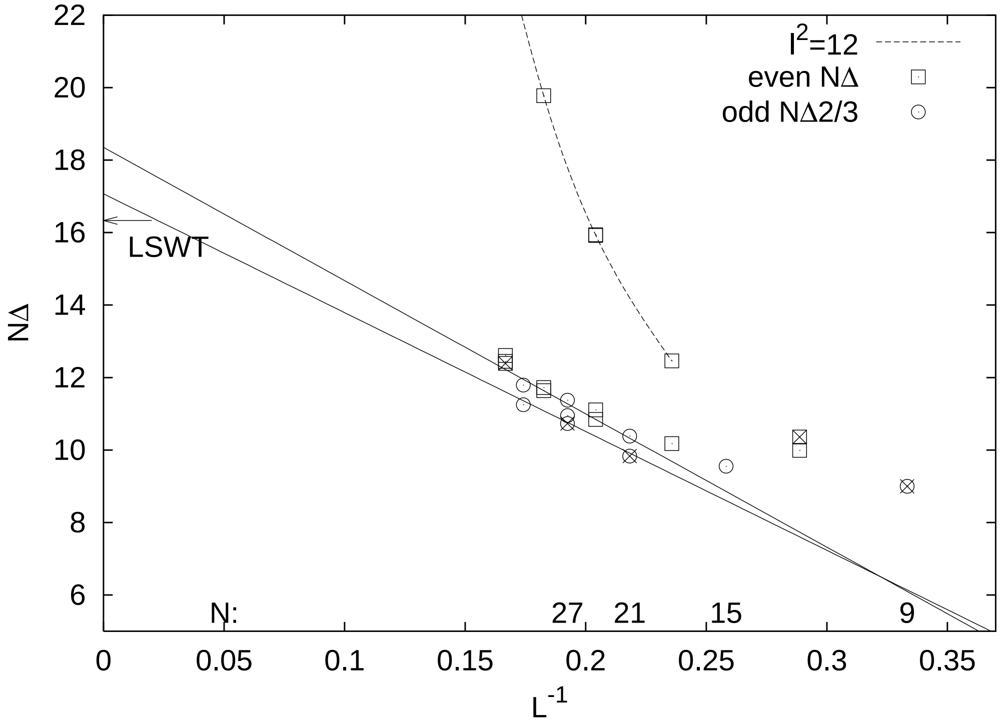


Abbildung 4.17: Produkt aus Systemgröße $N = L^2$ und Energielücke (Gap) $\Delta = E_1(N) - E_0(N)$ des HAFM für verschiedene Gitterzellen auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$ (even: N gerade; odd: N ungerade mit 2/3 skaliert). Ungünstigere Randbedingungen (Anhang E.2) führen zu größeren Energielücken Δ. Die durchgezogenen Linien sind lineare Extrapolationen „geeigneter“ Gitter. Die Kreuze markieren Gitterzellen mit p6- und p6m-Symmetrie. Zum Vergleich ist das Ergebnis linearer Spinwellentheorie (LSWT) eingetragen.

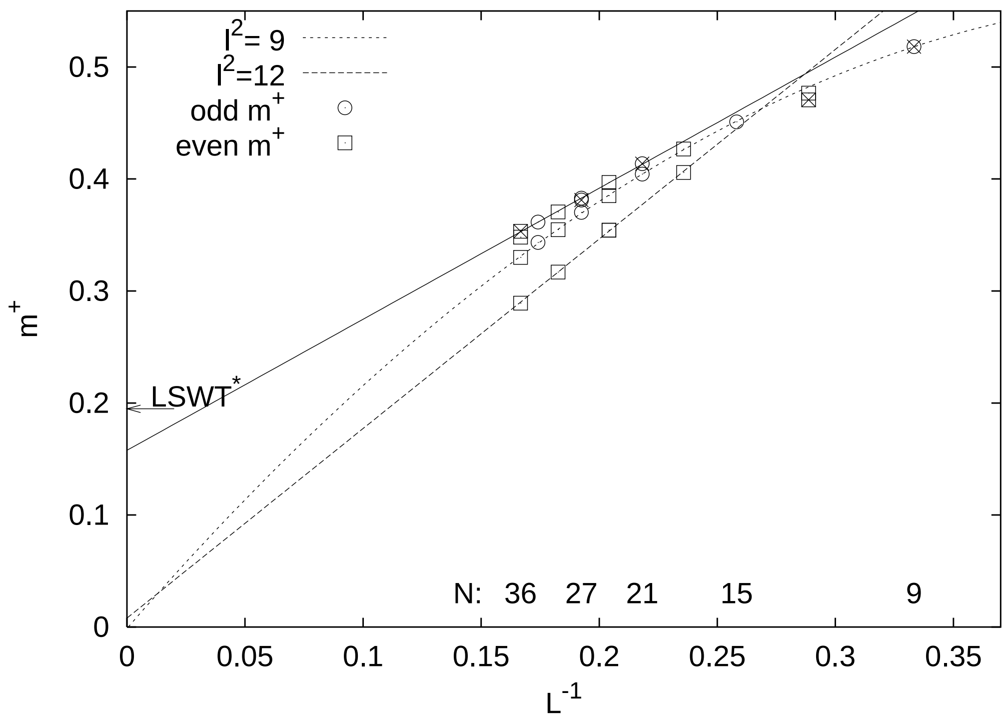


Abbildung 4.18: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Dreiecksgitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$ (even: N gerade, odd: N ungerade). Gitterzellen vom selben Typ (kurze Seitenlänge l mit $l^2 = 9$ oder $l^2 = 12$) haben deutlich kleinere Magnetisierung als Systeme mit „günstigeren“ Randbedingungen und skalieren zu $m^+(L \to \infty) = 0$. Die durchgezogene Linie ist eine lineare Extrapolation „geeigneter“ Gitter. Die Kreuze markieren Gitterzellen mit p6- und p6m-Symmetrie. Zum Vergleich ist der mit $\sqrt{2/3}$ skalierte Wert (siehe Text) aus linearer Spinwellentheorie eingetragen (LSWT*).

Tabelle 4.3: Vergleich der extrapolierten Daten aus dieser Arbeit mit Ergebnissen aus anderen Publikationen. E/N ist die Grundzustandsenergie pro Platz. Das Ergebnis von [81] ist eine obere Schranke für E.

Arbeit	E/N
Anderson'73 [78]	-0.462
RVB,FQH '87 [80]	-0.474
variationell '88 [81]	-0.5367
LSWT '89 [82]	-0.5388
SWT2 '92 [83]	-0.5468
ED36 '94 [87]	-0.5445
MC '99 [90]	-0.5458(1)
DMRG '01 [63]	-0.5442
ED36, diese Arbeit	-0.554(2)

vermutlich recht nahe. Bessere Abschätzungen werden zukünftige Rechnungen mit Gitterzellen bis 42 Plätzen erlauben. Tabelle 4.3 zeigt zusammenfassend die Ergebnisse einiger Arbeiten.

Die magnetische Anregungslücke $\Delta_1 = E_1 - E_0$ sollte für $N \to \infty$ verschwinden. Ein linearer Fit für $N = 18$, 24, 30 und 36 liefert $\Delta_1(L) = 0.129(2) + 7.75(5)N^{-1}$. Abbildung 4.17 zeigt das Produkt von N und Δ_1 in Abhängigkeit von der Systemgröße $N = L^2$. Da nur Vielfache von 6 einen Grundzustand mit $S^z = 0$ besitzen und gleichzeitig zur Dreiuntergitterstruktur passen, wurden auch Systeme mit ungerader Systemgröße N dargestellt, deren Anregungslücke mit dem Faktor 2/3 skaliert wurde. Lineare Extrapolation des Parameters D_4 liefert einen Wert von etwa 18(1) und ist somit vergleichbar mit dem Wert aus linearer Spinwellentheorie.

Die Magnetisierung in Abbildung 4.18 zeigt ebenfalls eine starke Abhängigkeit der Werte von den Randbedingungen. Den obigen Argumenten folgend, wurden zur Extrapolation wieder nur Werte $N \geq 21$ verwendet, weshalb sich ein kleinerer extrapolierter Wert für $m^+ = M^+/N = 0.158(7)$ mit

$$(M^+)^2 = \sum_{i,j=1}^{N} |\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle| \tag{4.9}$$

ergibt, der jedoch deutlich von Null verschieden bleibt. Das sind nur 39% des klassischen Wertes $m^+_{cl} = \sqrt{2/3}\, s$. Spinwellentheorie [86] liefert $m = 0.2387$ (47.8%, LSWT) für die Magnetisierung, wobei m identisch zum Doppelten des normierten Strukturfaktors $S(q)$ mit $q = (4\pi/3, 0)$ als

$$m^2 = 2S(q)/N^2 \quad \text{mit} \quad S(q) = \sum_{i,j}^{N} e^{iq(r_i - r_j)} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \tag{4.10}$$

ist. In zweiter Ordnung Spinwellentheorie erhält man eine etwas größere Magnetisierung von 50% [83]. Im klassischen Limes liefert die Spinwellentheorie für die Magnetisierung auf dem

en effektiven Operator ersetzen („fixed node“ oder FN-GFMC), bei dem kein Vorzeichenproblem auftritt. Die Grundzustandsenergie ist dann immer eine obere Grenze (variationell). Eine verbesserte Form ist die GFMC mit stochastischer Rekonfiguration (SR-GFMC) nach [91]. Sie liefert im Vergleich mit exakten Daten endlicher Systeme für das frustrierte J_1-J_2-Modell deutlich bessere Ergebnisse.

Dreiecksgitter $m_{cl} = s = 1/2$. Die Definitionen 4.9 und 4.10 unterscheiden sich nur durch die Wichtung w der Paarkorrelationen $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ in der Summe. In beiden Definitionen ist das Gewicht w für Korrelationen zwischen zwei Spins i und j aus demselben Untergitter (z.B. $i, j \in A$) gleich eins, gehören die Spins i und j dagegen verschiedenen Untergittern (z.B. $i \in A$ und $j \in B$) an, so ist das Gewicht in Definition 4.9 mit $|w| = 1$ doppelt so hoch wie in Definition 4.10 mit $w = -0.5$. Daraus resultiert für den Grundzustand ein einfacher Faktor von $\sqrt{3/2}$ zwischen den Werten m und m^+ (siehe Anhang A). Für den Quantenfall $s = 1/2$ ist der extrapolierte Wert $m^+ = 0.158(7)$ unter Berücksichtigung des Faktors $\sqrt{3/2}$ etwas unterhalb des Spinwellenwertes (LSWT) von $m = 0.2387$. Die Abweichung ist nicht überraschend, da der HAFM auf dem Dreiecksgitter mit einer zusätzlichen diagonalen Kopplung αJ in der Nähe des Punktes $\alpha = 0$ (Dreiecksgitter) eines Phasenüberganges bei $\alpha \approx 1/8$ (Übernächste-Nachbar-Kopplung [86]) hat, was eine größere Abweichung des Spinwellenresultates vermuten lassen würde (siehe auch Abb. 10 in [86]). Aber auch der bereits in [84][11] aus exakter Diagonalisierung für $N = 21, 27, 36$ extrapolierte Wert $m = 0.25$ stimmt gut mit dem Spinwellenwert überein. Das ist ein starkes Argument für einen geordneten Grundzustand.

Die Magnetisierungen für Gitterzellen mit kurzen Randvektoren ($l^2 = 9$ oder $l^2 = 12$, siehe auch Anhang E.3) sind in Abbildung 4.18 ebenfalls eingetragen. Sie zeigen für $N \to \infty$ eine verschwindende Magnetisierung. Die Extrapolation dieser Gitterzellentypen ließe sich noch weiter erhöhen, da die entsprechenden Systeme mit $N = 36$ durchaus mit den vorhandenen Rechenkapazitäten zu bewältigen sind. Da diese Fragestellung hier jedoch nicht von Relevanz ist, wurde auf die Berechnung der Torus-artigen $N = 36$-Gitterzellen zugunsten anderer Problemstellungen zunächst verzichtet.

4.4 Gitter mit Basis

Die meisten der 11 archimedischen Gitter gehören zur Gruppe der Gitter mit Basis. Nur zwei Gitter (Quadratgitter und Dreiecksgitter) sind primitive Gitter. Gitter mit Basis haben mehr als einen Gitterplatz pro Wigner-Seitz-Zelle. Die Eigenschaften des Grundzustandes des HAFM auf diesen Gittern werden in den folgenden Kapiteln beschrieben. Dabei wird mit den bekannteren Gittern (Honigwabengitter und Kagomé-Gitter) begonnen.

4.4.1 Der HAFM auf dem Honigwaben-Gitter

Der klassische Antiferromagnet auf dem Honigwabengitter ist Néel-geordnet. Die geometrische fällt mit der magnetischen Einheitszelle zusammen, da die geometrische Einheitszelle sowohl

[11] In der Arbeit [84] weicht die Definition von m über die magnetischen Untergitter mit $m^2 = 2S(q)/(N(N+6))$ und $S(q) = \langle \phi_0 | \mathbf{S}_{-q} \cdot \mathbf{S}_q | \phi_0 \rangle$ durch die anders gewählte Normierung auf maximales $S_A(S_A+1)$ (siehe auch [87]) etwas von der in [86] ab. Das spielt jedoch nur für endliche Systeme eine Rolle ($m_{36} = 0.400575$). Hier bezieht sich der klassische Wert auf Spins der Länge $s = 1$ und ist deshalb doppelt so groß, wie der in [84] angegebene Wert $m = 1/2$. In [90, 92] wird ebenfalls der Ordnungsparameter mit $m_A = 0.41$ (und $m_A^2(N = 36) = 0.7394$ exakte Diagonalisierung (Tabelle II in [90])) bestimmt; dessen Wert ist für mich leider nicht reproduzierbar. Statt dessen scheint $m_A^2(N = 36) = 0.641842$ mit $m_A^2 = M_A^2/(sN_A(sN_A+1))$ und $sN_A = N/6$ eher den korrekten Wert in Fig. 4 [90] und in Fig.11 [92] zu entsprechen.

einen Up- und einen Down-Spin enthält. Im ($s = 1/2$)-Fall gehören die deutlich separierten tiefsten Eigenzustände zu einer Symmetrie $Q_0 = (0, 0)$. Die deutlichen Anzeichen für Ordnung sind nicht verwunderlich, da das Honigwabengitter nicht frustriert ist. Es ist damit ähnlich zum Quadratgitter. Das Honigwabengitter hat jedoch die kleinste mögliche Koordinationszahl für zweidimensionale reguläre Gitter von $z = 3$. Mit seinen drei Nachbarn je Spin sollte das Honigwabengitter ein schwächeres Bestreben zur Ordnung als das Quadratgitter haben. Die Paarkorrelation $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ zwischen benachbarten Plätzen i und j ist außerdem betragsmäßig größer als beim Quadratgitter. Für beide Gitter ist der Ordnungsparameter verschieden von Null, so daß auch der HAFM auf dem Honigwabengitter Néel-geordnet sein sollte.

Das Honigwabengitter ist das zum Dreiecksgitter inverse Gitter. Es hat die gleichen Symmetrien wie das Dreiecksgitter (siehe Bild 4.15). Bild 4.19 zeigt das niedrig liegende Energiespektrum in Abhängigkeit von $S(S+1)$ für drei endliche Gitterzellen mit voller Gittersymmetrie. Zur besseren Übersicht wurde ein linearer Term von der Energie abgezogen (Anhang C.2).

Die Spektren ähneln denen des Quadratgitters sehr stark. Die niedrigsten Zustände gehören zu einer der beiden vom Dreiecksgitter (siehe Kapitel 4.3.2) her bekannten Symmetriegruppen Γ_1 und Γ_2 mit dem Blochvektor $Q_0 = (0, 0)$ und sind gerade b.z.w. ungerade unter Inversion. Sie liegen wie beim Quadratgitter in guter Näherung auf Parabeln, die in den entsprechenden Bildern dargestellt wurden.

Finite-Size-Skalierung

Für die Finite-Size-Extrapolation wurden Grundzustand und Energie der ersten magnetischen Anregung für alle möglichen geometrisch verschiedenen Gitterzellen bis $N = 34$ berechnet. Für $N = 36$ und $N = 38$ wurden wegen des hohen Berechnungsaufwandes nur einige Gitterzellen berechnet. Für $N = 36$ ($L = ((3, 1), (0, 6))$ in der Basis um $pi/3$ gegeneinander gedrehter Basisvektoren, siehe Anhang E.3) ist die Energie des Grundzustandes $E_0/N = -0.3672305$, die Energie der ersten magnetische Anregung $E_1/N = -0.3630789$ und das Quadrat der Magnetisierung $m^2 = 0.18711772$. Für das p6-symmetrische System mit $N = 38$ ist die Energie des Grundzustandes $E_0/N = -0.3667684$, die Energie der ersten magnetische Anregung $E_1/N = -0.3630149$ und das Quadrat der Magnetisierung $m^2 = 0.1843964$. In Bild 4.20 ist die Abhängigkeit der Energie von der Systemgröße $N = L^2$ dargestellt. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = \sqrt{3}$ (untere Kurve) und $l = \sqrt{4}$ (mittlere Kurve) besitzt. Gitterzellen mit voller p6m-Gittersymmetrie ($N = 6, 8, 18, 24, 32$) sind durch Kreuze hervorgehoben. Eine größere Gitterzelle mit voller p6m-Symmetrie ist für $N = 50$ realisierbar. Die Gitterzellen $N = 14$ und $N = 26$ und ebenso die nächst größeren Zellen $N = 38$ und $N = 42$ haben keine Reflexionsachsen, aber C_3 und C_6 Symmetriezentren. Sie haben somit p6-Symmetrie und und sind in den Bildern 4.20 bis 4.22 ebenfalls durch Kreuze hervorgehoben. Wie beim Quadratgitter liegen die Werte der Gitterzellen mit einer kurzen Seite auf einer nach unten abweichenden Kurve. Die Punktdichte nimmt mit steigender Gitterzellengröße im oberen Energiebereich zu. Extrapolation der bei jeweiligen N höchsten Energiewerte sollte dann zur besten Abschätzung führen. Die Extrapolation führt zu $E/N = -0.5448(3) - 1.25(2)L^{-3}$. Dabei wurden nur Systeme mit $N \geq 14$ benutzt. Monte-Carlo-Abschätzung [96] liefert $E/N = -0.5445(12)$. Spinwellentheorie zweiter Ordnung liefert $E_{SW}/N = -3s^2/2 - 0.314763s - 0.0165126 = -0.5489$ [93] und Reihenentwicklung liefert $E_{SE}/N = -0.5443(3)$ [94].

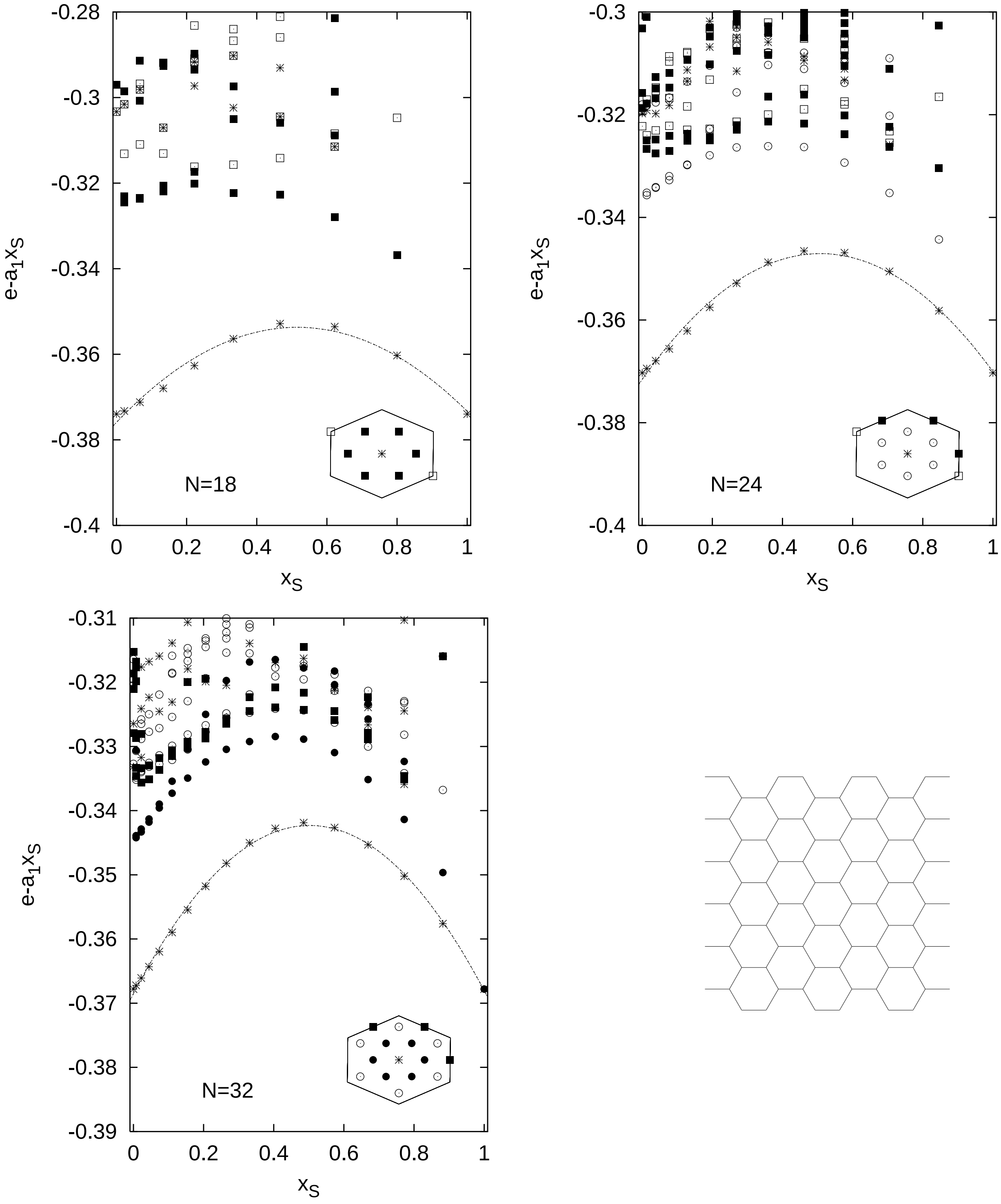


Abbildung 4.19: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen Honigwabengittern. Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

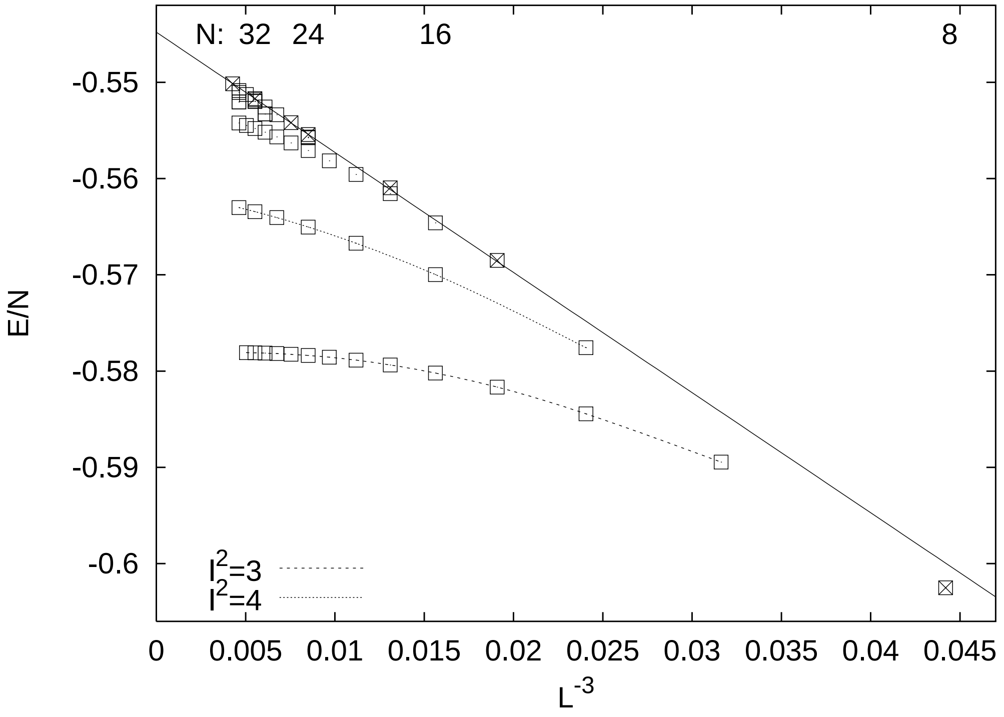


Abbildung 4.20: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Honigwabengitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = \sqrt{3}$ (untere Kurve) und $l = \sqrt{4}$ (mittlere Kurve) besitzt. Gitterzellen mit p6-Gittersymmetrie sind durch Kreuze hervorgehoben.

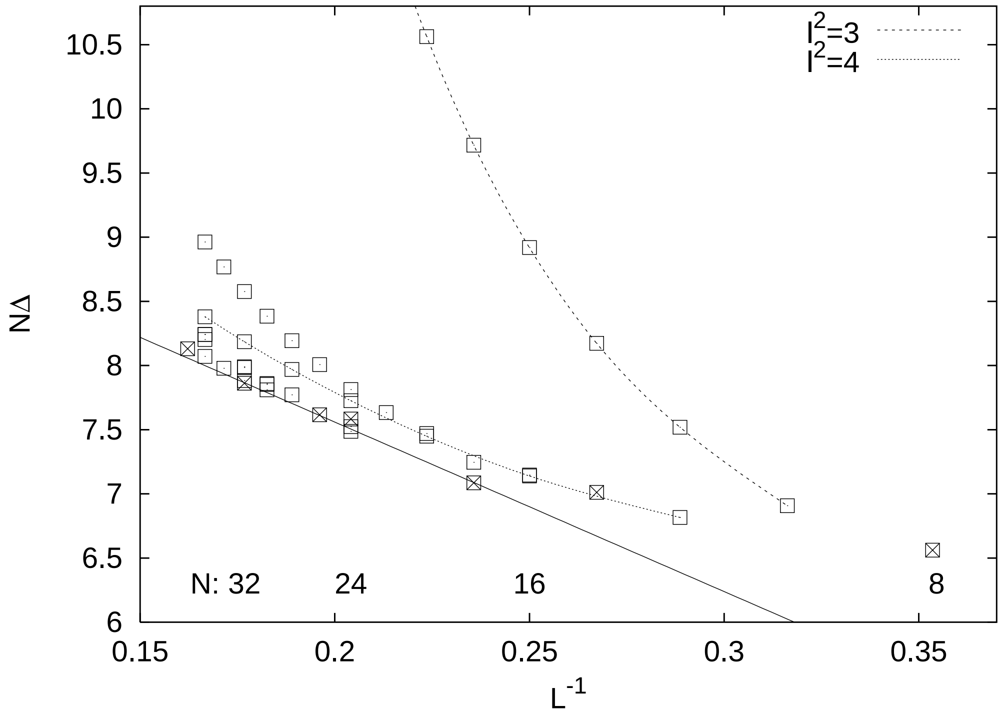


Abbildung 4.21: Produkt aus Systemgröße $N = L^2$ und Energielücke (Gap) $\Delta = E_1(N) - E_0(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem Honigwabengitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Ungünstigere Randbedingungen führen zu größeren Energielücken Δ. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = \sqrt{3}$ (obere Kurve) und $l = \sqrt{4}$ (mittlere Kurve) besitzt. Gitterzellen mit p6-Gittersymmetrie sind durch Kreuze hervorgehoben.

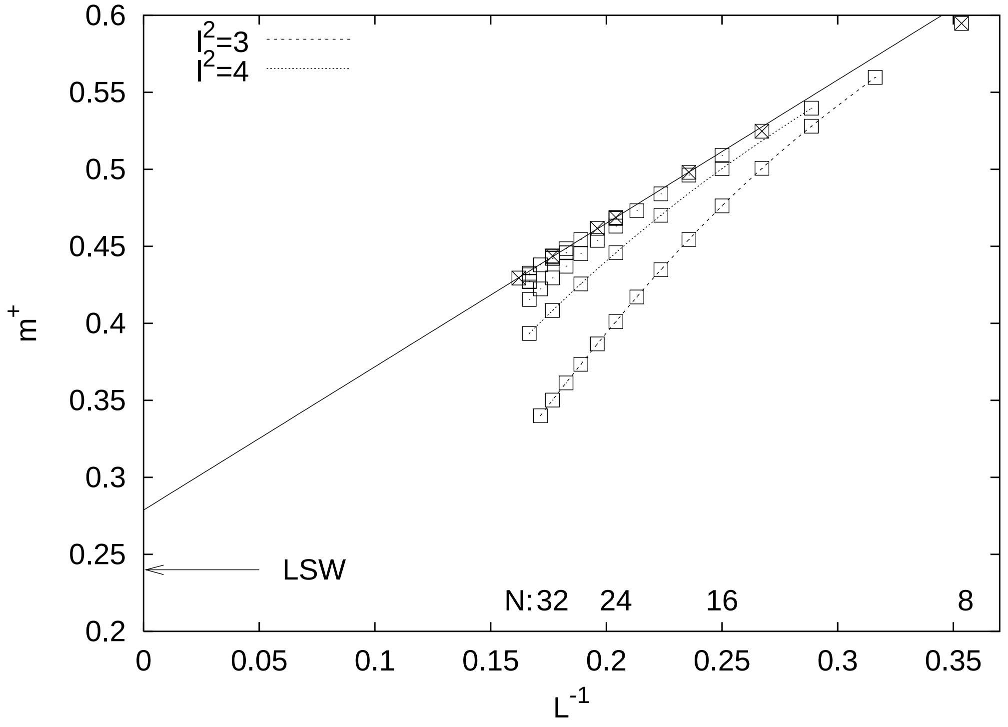


Abbildung 4.22: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Zellen auf dem Honigwabengitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = \sqrt{3}$ (untere Kurve) und $l = \sqrt{4}$ (mittlere Kurve) besitzt. Gitterzellen mit p6-Gittersymmetrie sind durch Kreuze hervorgehoben.

Die Extrapolation der magnetische Anregungslücke unter Verwendung der p6-symmetrischen Gitterzellen mit im Vergleich zu den anderen Gitterzellen minimalen Werten führt in linearer Ordnung zu $\Delta = E_0(S=1) - E_0(S=0) = 0.054(4) + 6.13(11)N^{-1}$. Erst mit der nächst höheren Ordnung $\Delta = 0.014(11) + 9.28(85)N^{-1} - 10(3)N^{-3/2}$ verschwindet die Anregungslücke unter Berücksichtigung der in Klammern angegebenen statistischen Fehler. In Abbildung 4.21 ist das Produkt aus Spingap Δ und Systemgröße N dargestellt. Zur Extrapolation wurden nur die p6-symmetrischen Zellen mit $N = 18, 26, 32$ benutzt. Ein linearer Fit liefert $N\Delta = 10.20(3) - 13.20(15)L^{-1}$. Die Grafik zeigt auch, daß der Einfluß der Randbedingungen hier deutlicher sichtbar ist als bei Energie und Magnetisierung.

Die Extrapolation der Magnetisierung m^+ ist in Bild 4.22 dargestellt. Da das Honigwabengitter bipartit ist, stimmt m^+ (nach Definition A.11) mit der üblichen „staggered“ Magnetisierung (m oder m^{rms} in Anhang A, analog zum Quadratgitter über die Untergitter A und B definiert) überein. Ein linearer Fit der p6-symmetrischen Gitterzellen mit $N \geq 14$ liefert $m^+ = 0.278(2) + 0.931(8)L^{-1}$. Damit ist die Magnetisierung des HAFM auf dem Honigwabengitter nur ca. 10% unter dem des Quadratgitters. Monte-Carlo-Rechnungen [96] liefern $m_{MC} = 0.22(3)$, Spinwellen- und Reihenentwicklung [94] liefern $m_{SW} = 0.2418$ (in Übereinstimmung mit [97]) und $m_{SE} = 0.266(9)$.

Auch andere Arbeiten deuten auf einen magnetisch geordneten Grundzustand hin. So ist das Honigwabengitter ein Spezialfall des parametrisierten Trellis-Gitters (Kapitel 4.4.4 mit $J_\alpha = 0$ oder [103] mit $J_2 = 0$). Das in dieser Arbeit vorgestellte Phasendiagramm zeigt für den Fall des Honigwabengitters einen Néel-geordneten Grundzustand. Das staggered Modell [98] enthält neben dem Grenzfall des quadratischen Gitters ($\alpha = 1$) auch den Grenzfall $\alpha = 0$ des Honigwabengitters. Vergleichbare Resultate werden auch in anderen Arbeiten [94, 95] erhalten.

4.4.2 Der HAFM auf dem Kagomé-Gitter

Der Name „Kagomé“ stammt vermutlich von japanischen Matten [117], bei denen die Mattenfasern in Winkeln von 60° miteinander verflochten sind. Das p6m-symmetrische Kagomé-Gitter (3.6.3.6) läßt sich am einfachsten durch Aneinanderkettung von Dreiecken an ihren Ecken aufbauen. Eine andere Möglichkeit ist die Konstruktion aus dem Dreiecksgitter, indem man entlang der 60°-Achsen jeden zweiten Platz entfernt. Dann fehlen 1/4 aller Gitterplätze des Dreiecksgitters, weshalb man das Kagomé-Gitter auch als 1/4-verdünntes Dreiecksgitter bezeichnen kann. Wegen der Dreiecke ist der AFM auf dem Kagomé-Gitter frustriert. Hinzu kommt eine im Vergleich zum Dreiecksgitter geringere Koordinationszahl von $z = 4$. Beides schwächt im allgemeinen langreichweitige magnetische Ordnung. Die hexagonale Wigner-Seitz-Zelle des Kagomé-Gitters enthält drei Plätze, die auf den Mittelpunkten der Seiten der Wigner-Seitz-Zelle (Abbildung 4.23) liegen.

Ins Interesse der Physiker rückte das Kagomé-Gitter bei der Suche nach exotischen Ordnungen in Spinsystemen. Nachdem sich die Annahme von Anderson *et al.* [78, 79], der Grundzustand des HAFM auf dem Dreiecksgitter sei ungeordnet, nicht bestätigt hat [62, 84, 87, 90, 88], wurde der HAFM auf dem Kagomé-Gitter zum wichtigsten Kandidaten für einen ungeordneten Zustand. Zahlreiche Arbeiten der letzten Jahre (z.B. [104, 105, 108, 110, 112, 113, 114, 115, 116, 118] und Referenzen darin) sind daher dieser Problematik gewidmet.

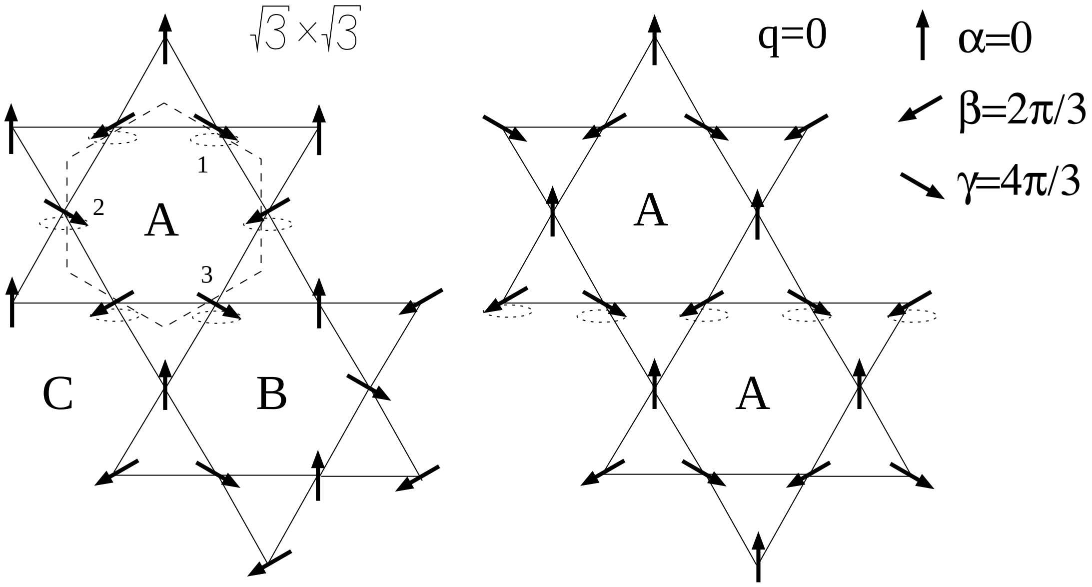


Abbildung 4.23: Mögliche Grundzustände des klassischen Antiferromagneten auf dem Kagomé-Gitter (3.6.3.6). Oben links ist eine geometrische Wigner-Seitz-Zelle bestehend aus drei Spins (A1 bis A3) durch gestrichelte Linien hervorgehoben. Die gestrichelten Ellipsen zeigen weitere Freiheitsgrade des hoch entarteten klassischen Grundzustandes an.

Der Grundzustand des klassischen Antiferromagneten (O(3)- oder Vektormodell) auf dem Kagomé-Gitter ist ebenfalls Gegenstand intensiver Untersuchungen [106, 107, 109]. Seine Energie ist $E/N = 2J\cos(2\pi/3)$ und benachbarte Spins sind wie beim Dreiecksgitter um 120° gegeneinander geneigt. Anders als beim Dreiecksgitter gibt es jedoch unendlich viele nichttriviale Realisierungen von Spinkonfigurationen, bei denen jeweils drei benachbarte Spins um 120° gegeneinander geneigt sind. Zwei ausgewählte Varianten des Grundzustandes mit festem Wellenvektor sind in Bild 4.23 dargestellt. Der linke Zustand in Bild 4.23 hat die gleiche Symmetrie, wie der klassische Grundzustand des Dreiecksgitters. Dessen magnetische Elementarzelle ist wie beim Dreiecksgitter dreimal so groß wie die geometrische Elementarzelle. Daher kommt auch die Bezeichnung als $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand. Der rechte Zustand ($q = 0$) in Bild 4.23 ist invariant gegen Translation um einen Einheitsvektor $\mathbf{a}_i$. Damit ist seine magnetische Elementarzelle identisch zur geometrischen Elementarzelle. Die hohe Entartung der Grundzustände resultiert aus den zusätzlichen Freiheitsgraden, die beide Varianten haben. Im $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand (Bild 4.23 links) können die Spins, die auf einem Hexagon liegen (z.B. um A), um einen beliebigen Winkel um eine gemeinsame Achse der benachbarten Spins (Spins in Richtung α) gedreht werden, ohne daß sich die Energie des Zustandes ändert. Im q=0-Zustand (Bild 4.23 rechts) können sich die Spins entlang einer Geraden um einen beliebigen Winkel um eine gemeinsame Achse der benachbarten Spins (Spins in Richtung α) drehen, ohne die Energie zu verändern. Beide Freiheiten sind durch gestrichelte Ellipsen im Bild 4.23 angedeutet.

Die Untersuchung des HAFM auf dem Kagomé-Gitters ist wesentlich komplizierter als die der vorangehenden Gitter. Zum einen ist wegen des komplizierteren Grundzustandes des klassischen AFM auf dem Kagomé-Gitter auch für den Quantenfall ein komplizierterer Grundzustand zu erwarten, zum anderen enthält die geometrische Elementarzelle bereits drei Spins. Ein dem

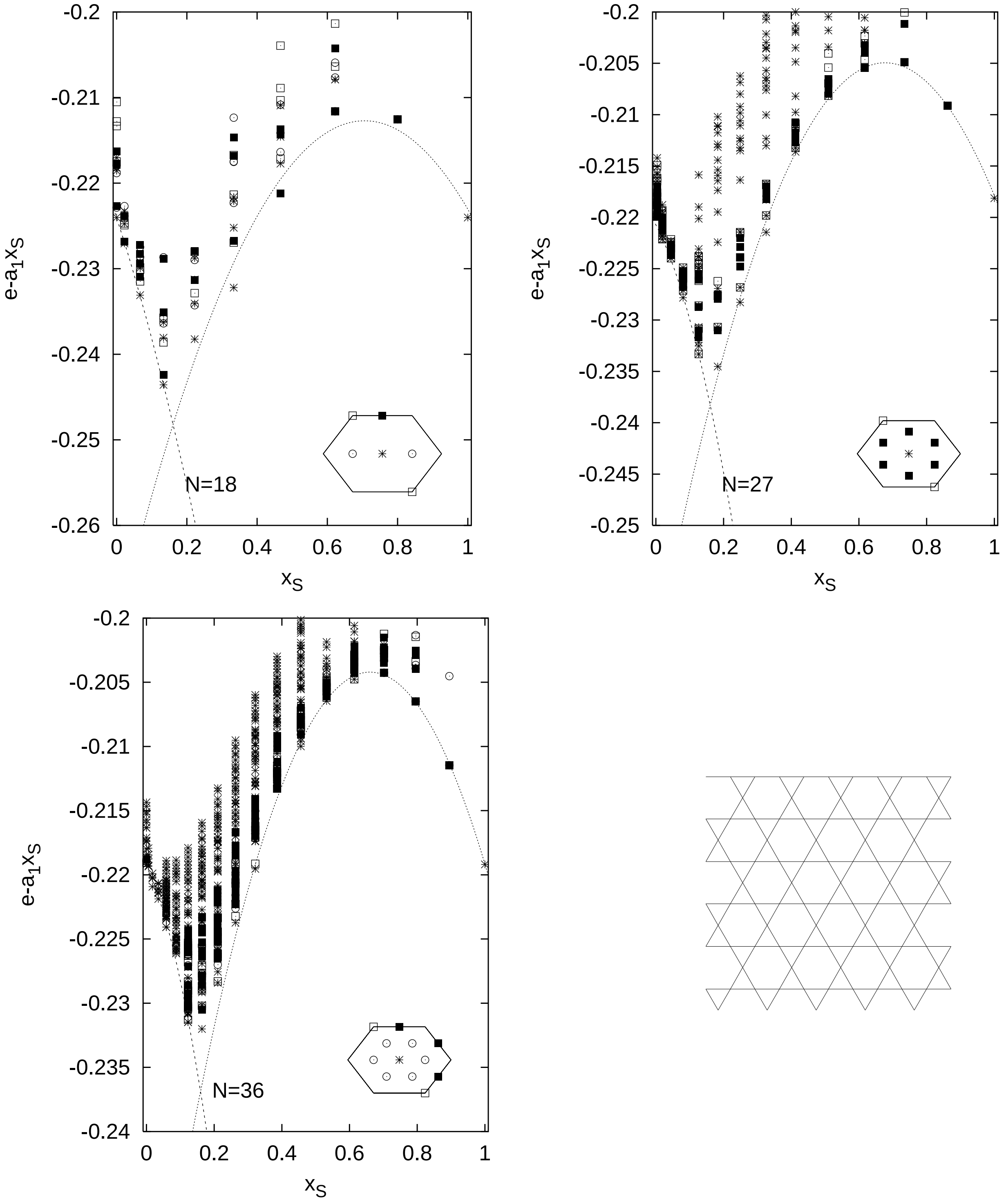


Abbildung 4.24: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen Kagomé-Gittern. Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

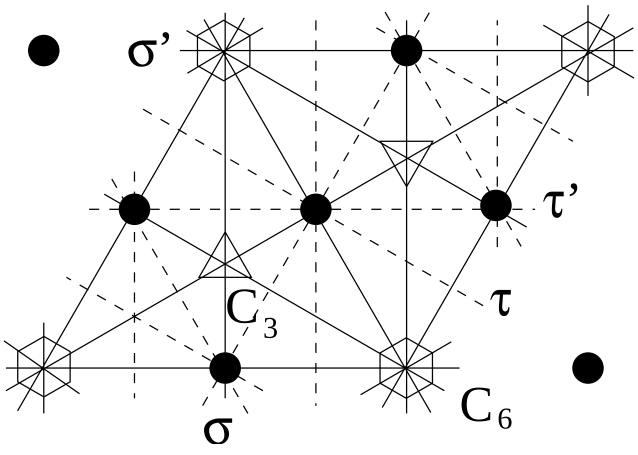


Abbildung 4.25: Symmetrien des Kagomé-Gitters. Die größeren Kreise markieren die Position der Spins. Sie sind gleichzeitig die Inversionszentren. Die Dreiecke markieren die C_3-Symmetriezentren. Die durchgezogenen Geraden markieren axiale Spiegelungen. Die Spiegelachsen σ verlaufen durch C_3 und C_6-Zentren. Die Spiegelachsen σ' verlaufen nur durch C_6-Zentren. Die gestrichelten Linien markieren die Gleitspiegelachsen parallel zu den Spiegelachsen σ beziehungsweise σ' (τ beziehungsweise τ').

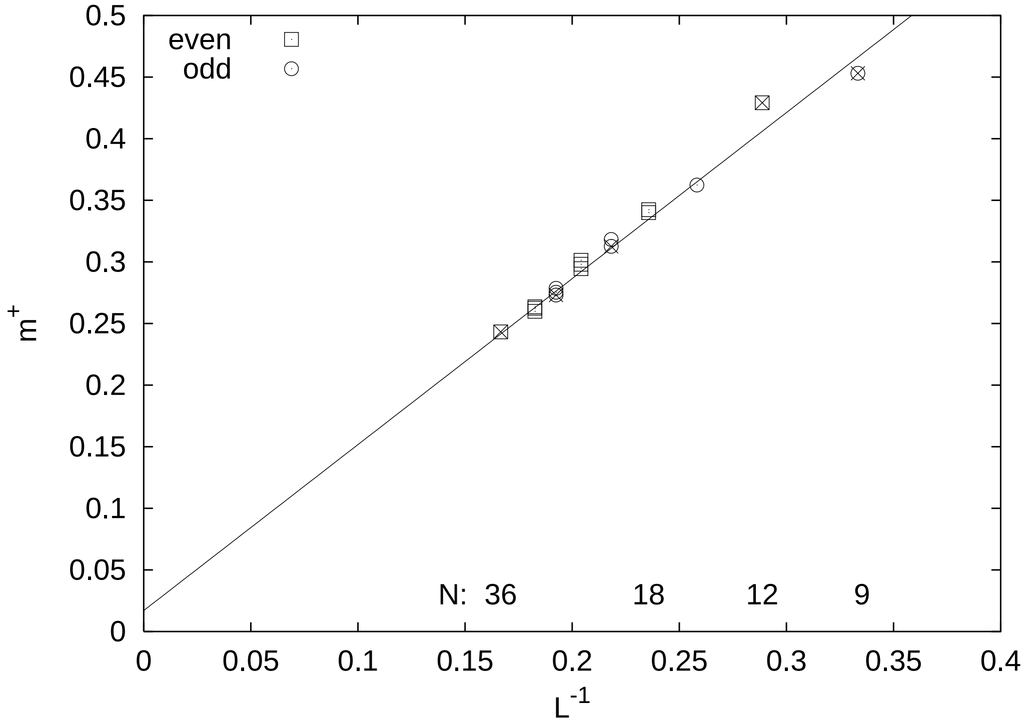


Abbildung 4.26: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Zellen auf dem Kagomé-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$ (even: N gerade, odd: N ungerade). Die Kreuze markieren Gitterzellen mit p6- und p6m-Symmetrie.

$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand entsprechender quantenmechanischer Zustand benötigt dann Vielfache von 9 Spins. Fordert man dazu noch p6m-symmetrische Gitterzellen, so findet man nur Gitterzellen mit $N = 9, 27, 36, 39$, die für die exakte Diagonalisierung besonders geeignet erscheinen. Die Berechnung der $N = 39$-Gitterzelle ist noch zu aufwendig und die verbleibenden drei Gitterzellen müssen auch noch in Systeme mit gerader und ungerader Spin-1/2-Zahl unterteilt werden. Damit stehen nur wenige geeignete Gitterzellen zur Verfügung und entsprechend vorsichtig müssen die Schlußfolgerungen aus den exakten Daten der endlichen Systeme gezogen werden. Trotzdem ist weitgehend klar, daß der Grundzustand des HAFM auf dem Kagomé-Gitter eine Spinflüssigkeit sein sollte. Nur die genaue Natur dieses Zustandes und dessen Anregungen ist weitgehend unklar [113]. Aus den Energiespektren (siehe Bilder 4.24) endlicher Systeme lassen sich folgende drei Argumente für einen Spinflüssigkeitsgrundzustand finden [113]:

(1) Die Energie der niedrigsten Zustände mit verschiedenen Momenten **k** ist weitgehend unabhängig von **k**. Für $N = 36$ variieren die Energien der niedrigsten Zustände mit verschiedenen Wellenvektoren **k** um weniger als 0.2% (siehe Tab. 1 in [113]).

(2) Das System reagiert kaum auf verdrehte Randbedingungen (twisted boundary conditions, siehe [111]).

(3) Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von der Teilchenzahl ist um mehr als ein Faktor 2 kleiner als beim HAFM auf dem Dreiecksgitter. So schwankt die Energie des HAFM auf dem Dreiecksgitter zwischen $N = 9$ und $N = 36$ um etwa 10%, wogegen die Energie des HAFM auf dem Kagomé-Gitter um nur 4.6% schwankt.

Der auffällige Knick bei $S = N/6$ im Verlauf der niedrigsten Energien in Abhängigkeit von S beziehungsweise x_S dürfte auf den Ising-Anteil im Heisenbergoperator zurückzuführen sein. Er ist von ähnlicher Natur wie der Knick beim Dreiecksgitter.

Frühe Finite-Size-Approximationen lassen eine endliche magnetische Anregungslücke von $J/4$ vermuten [108]. Spätere Rechnungen unter Einbeziehung der $N = 36$-Daten deuten auf eine untere Grenze der magnetischen Anregungslücke von $J/20$ hin [113]. Zumindest die in Bild 4.27 gezeigten exakten Daten lassen jedoch keinen wirklich klaren Trend für eine endliche oder verschwindende magnetische Anregungslücke erkennen.

Eine andere Besonderheit der Energiespektren tritt jedoch deutlicher hervor. So befinden sich zwischen Grundzustand und erster magnetischer Anregung eine Reihe nichtmagnetischer Anregungen, deren Anzahl mit wachsender Systemgröße stark zunimmt. Waldtmann *et al.* [113] ermittelten ein Wachstum dieser Zustände mit $1.16(2)^N$. Im thermodynamischen Limes sollte das nichtmagnetische Spektrum des HAFM auf dem Kagomé-Gitter daher ein mit dem Grundzustand verbundenes, lückenloses Kontinuum sein. Dieses Kontinuum erinnert auch an die hohe Entartung des klassischen Grundzustandes.

In Abbildung 4.26 wird die Magnetisierung m^+ für endliche Gitterzellen gezeigt. Die Extrapolation zu einer verschwindenden Magnetisierung unterstützt die Argumentation gegen einen magnetisch geordneten Grundzustand. Sollte der Grundzustand wider Erwarten doch geordnet sein, so ist der Ordnungsparameter sehr klein und die Dispersion der Anregungen sehr schwach. Die Magnetisierung für $N = 36$ wurde aus den in [108] aufgeführten Spinkorrelationen berechnet. Zu dessen Berechnung wurden alle Punktsymmetrien und Spininversion benutzt.

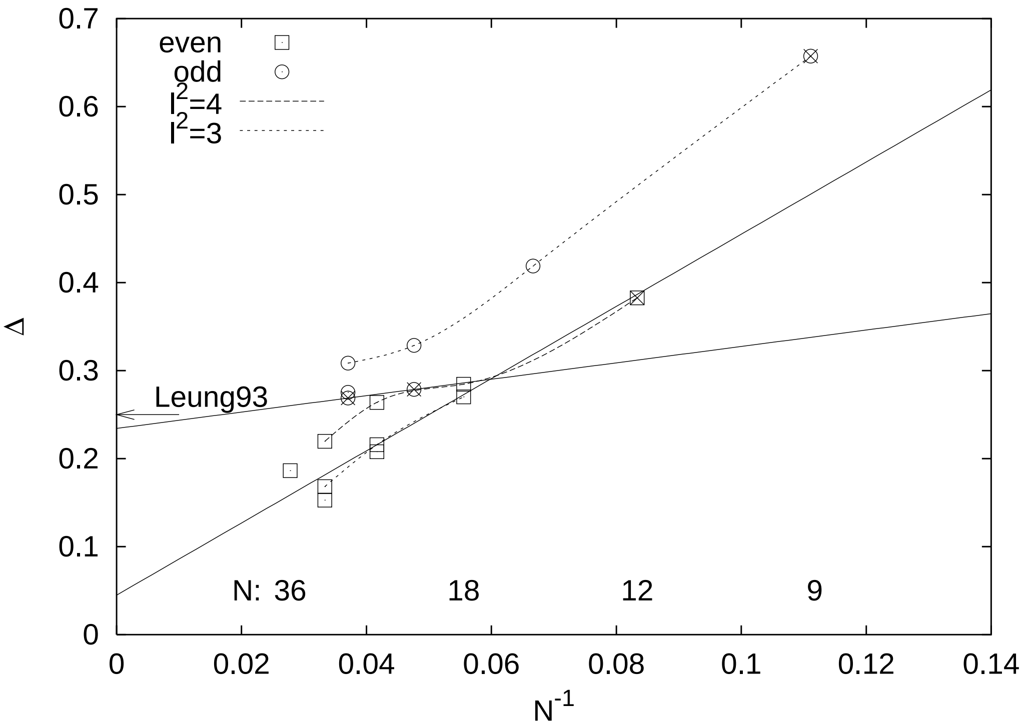


Abbildung 4.27: Magnetische Anregungslücke (GAP) des HAFM für endliche Zellen auf dem Kagomé-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$ (even: N gerade, odd: N ungerade). Leung und Elser [108] vermuten eine Anregungslücke von $\Delta \approx J/4$.

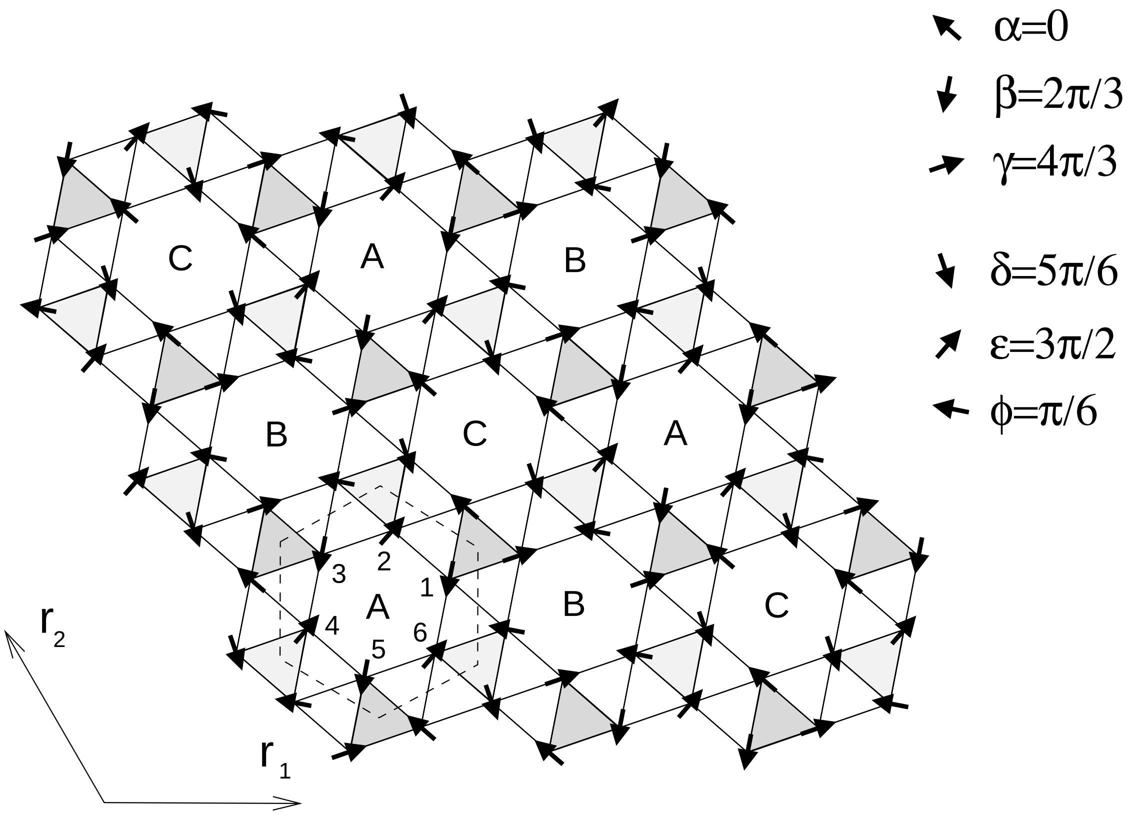


Abbildung 4.28: Grundzustand des klassischen AFM auf dem T4H-Gitter. Unten links ist eine Wigner-Seitz-Zelle (gestrichelt) hervorgehoben. Sie enthält 6 Spins (A1 bis A6). Die klassischen Spins in den Einheitszellen A, B und C sind um jeweils $2\pi/3$ gegeneinander verdreht. Spins von zwischen drei Hexagonen liegenden Dreiecken sind um jeweils $2\pi/3$ im positiven (dunkelgraue Dreiecke) oder im negativen (hellgraue Dreiecke) Drehsinn gedreht.

4.4.3 Der HAFM auf dem T4H- oder Maple-Leaf-Gitter

Entfernt man aus dem Dreiecksgitter jeden siebten Gitterplatz, so entsteht ein 1/7 ausgedünntes Dreiecksgitter, welches dann sowohl aus Dreiecken als auch aus Sechsecken besteht. Das ist in etwa vergleichbar mit dem Kagomé-Gitter, was man durch Entfernen jedes vierten Gitterplatzes erhält. Als einziges der elf archimedischen Tilings existiert dieses Gitter in zwei gespiegelten Formen. Die Koordinationszahl ist mit $z = 5$ kleiner als die des Dreiecksgitters aber größer als die von Kagomé- und Honigwabengitter. Die interessanten geometrischen Eigenschaften wurden in [99, 100] bereits vorgestellt. Auf Betts [99] geht auch der Name „Maple-Leaf“-Gitter zurück, da sich die Symmetrie des Gitters gut durch Dekoration mit Ahornblättern hervorheben läßt. Nach der in Abschnitt 4.2 eingeführten Notation wird das Archimedische Gitter $3^4.6$ hier auch mit T4H-Gitter abgekürzt.

Der klassische Grundzustand des AFM auf diesem Gitter ist in Bild 4.28 dargestellt. Analog zum Dreiecksgitter bildet sich eine magnetische Struktur heraus, die aus drei verschiedenen geometrischen Elementarzellen besteht, in denen die Spins benachbarter Elementarzellen gegeneinander um $\kappa_{1,2} = \pm 2\pi/3 = \pm 120°$ verdreht sind ($\phi_i(\mathbf{R}) = \phi_i + (n_1 - n_2)\kappa_1$ mit $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$).

Innerhalb der Elementarzelle stehen zwei Tripel von parallelen Spins auf den Eckpunkten des Sechseckes, die zueinander um 150° verkippt sind. Im Gegensatz zu den vorher behandelten Gittern sind nicht alle Bindungen im T4H-Gitter äquivalent. Daher treten beim T4H-Gitter drei verschiedene Winkeldifferenzen zwischen benachbarten Spins auf. Die größte Winkeldifferenz von 150° findet man auf den Sechsecken ($\alpha_H = 5\pi/6$, gestrichelte Bindungen in Abbildung 4.29), jeweils 120°-Bindungen auf den Dreiecken ($\alpha_T = 2\pi/3$, durchgezogene Linien), die die Sechsecke verbinden und 90°-Differenz auf den Diagonalen zwischen zwei Sechsecken ($\alpha_D = \pi/2$, gepunktete Bindungen).

Die magnetische Elementarzelle enthält drei geometrische Elementarzellen und damit 18 Spins. Endliche Gitter, deren Randbedingungen zum klassischen Grundzustand passen, sollten also Vielfache von 18 Spins enthalten. Damit ist die Anzahl der der exakten Diagonalisierung zugänglichen endlichen Gitter stark begrenzt. Dazu kommt, daß erst das $N = 54$ System wieder die volle p6-Symmetrie des T4H-Gitters besitzt.

Da prinzipiell nicht ausgeschlossen werden kann, daß der Grundzustand des Quantensystems eine vom klassischen System abweichende magnetische Ordnung aufweist, sollen hier weitere klassische Zustände diskutiert werden, die dann als Grundlage für Vergleiche mit Ergebnissen aus exakter Diagonalisierung und Spinwellenrechnungen herangezogen werden können. Da der klassische Grundzustand die Symmetrie des Gitters haben sollte, können zwischen benachbarten Spins nur drei verschiedene Winkeldifferenzen α_i auftreten. Die Winkeldifferenzen für Bindungen auf den Dreiecken um die dreifachen Symmetrieachsen bekommen den Index T, die Winkeldifferenzen für Bindungen auf den Sechsecken um die sechsfachen Symmetrieachsen bekommen den Index H und die Winkeldifferenzen für Bindungen über die verbleibenden Inversionszentren bekommen den Index D.

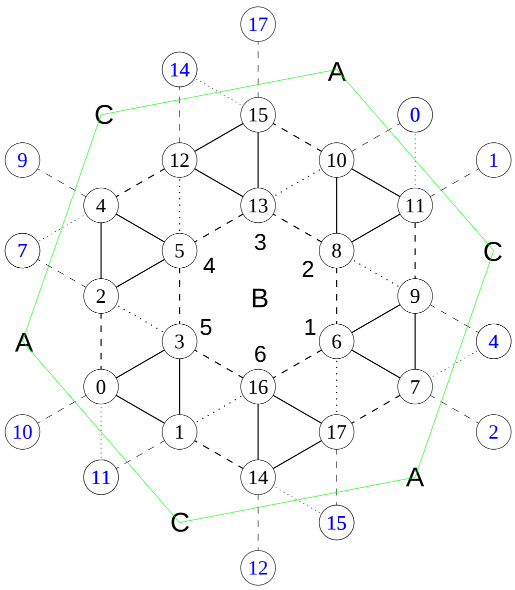
Die Winkeldifferenz der benachbarten Spins auf den Dreiecken α_T kann aus Symmetriegründen nur 0 oder $\pm 2\pi/3$ betragen. Zwischen Spins auf den Sechsecken kann α_H nur ein Vielfaches von $2\pi/6$ oder abwechselnd $\pm\delta$ sein ($\delta = 5\pi/6$ ist der Grundzustand des klassischen AFM). Die Winkeldifferenz α_D wird durch die anderen zwei über $\alpha_D = 2\pi - \alpha_T - \alpha_H$ festgelegt. Die Energie des klassischen Zustandes ist dann durch $5E/N = 2c_H + 2c_T + c_D$ mit den Paarkorrelationen $c_i = \cos(\alpha_i)$ definiert. In Tabelle 4.4 sind alle Varianten aufgeführt, die obige Bedingungen erfüllen. Die erste Zeile von dieser Tabelle beschreibt den Zustand mit minimaler Energie $2E/(5N) = -(\sqrt{3}+1)/5 \approx -0.5464$ pro Bindung.

Die kleinste endliche Gitterzelle, die alle in Tabelle 4.4 aufgelisteten Zustände ermöglicht, ist eine Gitterzelle mit $N = 18$ Spins. Bild 4.29 zeigt die $N = 18$ Gitterzelle mit den Randvektoren $(2,1), (1,2)$ und in der Tabelle daneben die Paarkorrelationen $c_i = \langle S_0 S_j \rangle$ für den quantenmechanischen Grundzustand. Die Symmetrien des Grundzustandes sind $P(u \leftrightarrow d) = -1$, $R_3 = +1$ (Rotation um eine dreifache Symmetrieachse) und $R_6 = -1$ (Rotation um eine sechsfache Symmetrieachse).

Die Korrelation $c_T = \langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_1 \rangle$ (der Mittelwert für $N = 36$ ist $c_T = -0.1777$) ist nur wenig kleiner als die Korrelation im Dreiecksgitter (für $N = 36$ ist $c_T = -0.186791$), die Korrelation $c_H = \langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_2 \rangle$ (der Mittelwert für $N = 36$ ist $c_H = -0.3656$) ist ein wenig kleiner als die Nachbarkorrelation im Honigwabengitter (für $N = 32$ ist $c_H = -0.367791$) und die Dimerkorrelation $c_D = \langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_{11} \rangle$ (der Mittelwert für $N = 36$ ist $c_D = -0.0375$) verschwindet fast. Damit verhalten sich die Nachbarkorrelationen des $s = 1/2$-Quantengrundzustandes wie es ein entsprechend zum klassischen Grundzustand geordneter Grundzustand eines Quantensystems erwarten läßt.

Tabelle 4.4: Der Gittersymmetrie genügende klassische Zustände auf dem T4H-Gitter. ϕ_i mit $i = 1 \dots 6$ sind die Winkel der Spins einer Wigner-Seitz-Zelle (auf den 6 Ecken des Sechseckes, siehe Bild 4.29 B1 bis B6), κ_i ist die Winkeldifferenz von Spins auf adäquaten um einen Gittervektor $\mathbf{a}_i$ verschobenen Plätzen benachbarter Elementarzellen, α_i die Winkeldifferenz benachbarter Spins (siehe Text, $\alpha_H = \phi_2 - \phi_1$, $\alpha_T = (\phi_3 + \kappa_1) - \phi_1$ und $\alpha_D = (\phi_4 + \kappa_1) - \phi_1$) und $2E/(5N) = (2c_H + 2c_T + c_D)/5$ die Energie pro Bindung des durch die Winkel α_i definierten Zustandes.

	ϕ_i/π						κ_i/π		α_H/π	α_T/π	α_D/π	$2E/(5N)$
$i:$	1	2	3	4	5	6	1	2				
	0	5/6	0	5/6	0	5/6	2/3	4/3	5/6	2/3	1/2	-0.5464
	0	δ	0	δ	0	δ	2/3	4/3	δ	2/3	$\delta + 2/3$	$-0.5464 \dots 0.146$
	0	δ	0	δ	0	δ	0	0	δ	0	δ	$-0.2 \dots 1.0$
	0	1/3	2/3	3/3	4/3	5/3	0	0	1/3	2/3	1	-0.2
	0	2/3	4/3	0	2/3	4/3	0	0	2/3	4/3	0	$+0.2$



j	$\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_j \rangle$	$\mathbf{R}^2$	SL
0	0.750000	0	A1
1	-0.186299	1	C3 - c_T
2	-0.366673	1	A2 - c_H
4	0.039003	4	C6
5	0.145098	3	B4
6	-0.099672	7	B1
7	0.180027	3	A3
8	0.140873	3	B2
9	-0.072868	4	C5
11	0.010923	1	C4 - c_D
17	-0.174804	4	A4

Abbildung 4.29: Endliche Gitterzelle für $N = 18$ Plätze auf dem T4H-Gitter mit periodischen Randbedingungen. Sie enthält drei geometrische Elementarzellen A, B und C mit jeweils 6 Spins. Die voneinander verschiedenen Paarkorrelationen sind in der nebenstehenden Tabelle aufgeführt und sind mit dem klassischen Grundzustand vergleichbar. Die Korrelationen zwischen benachbarten Plätzen werden mit c_T (triangle), c_H (hexagon) und c_D (dimer) abgekürzt.

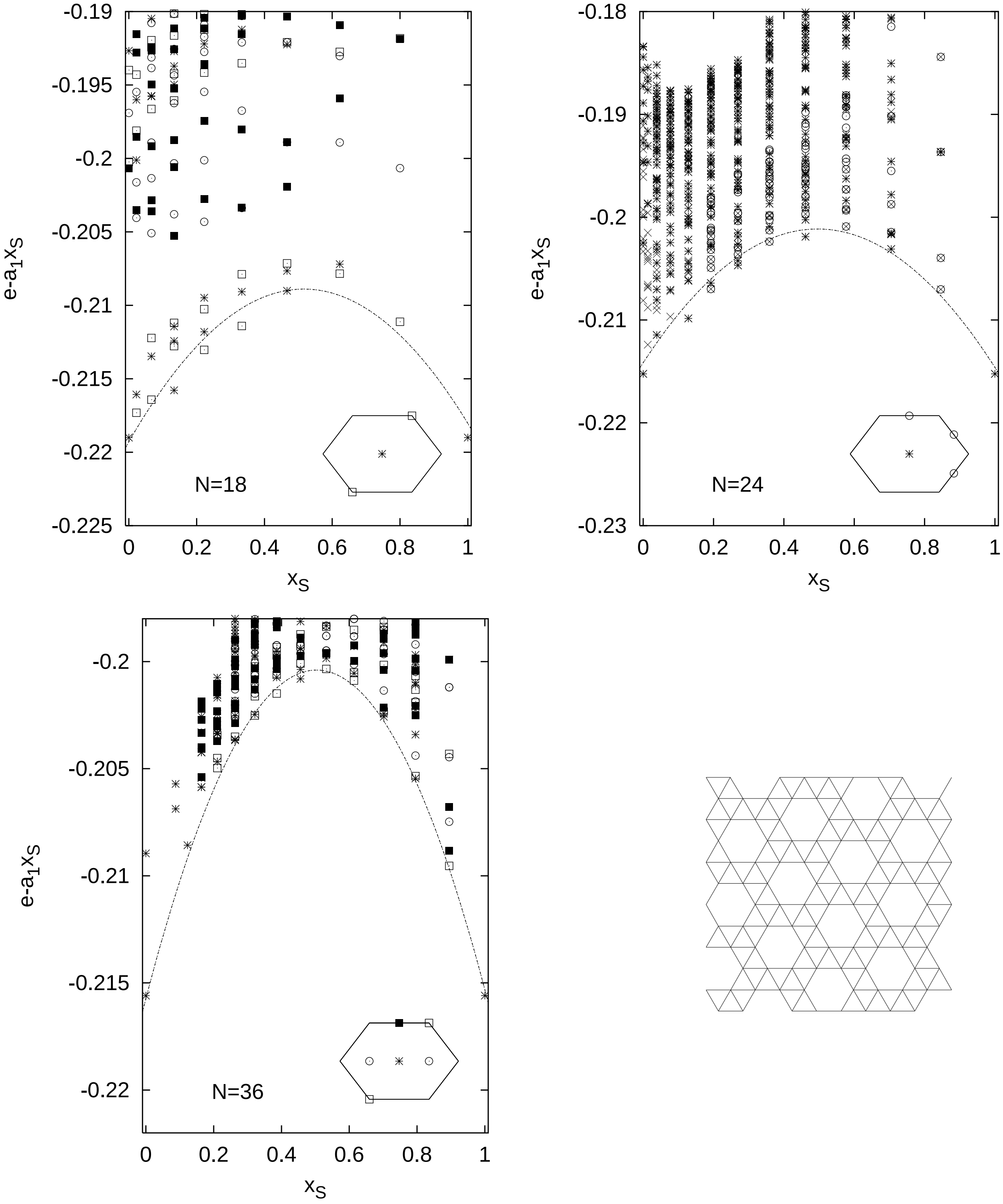


Abbildung 4.30: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen T4H-Gittern. Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2). Für $N = 36$ fehlen wegen des hohen Rechenaufwandes die Energien für einige Werte von S.

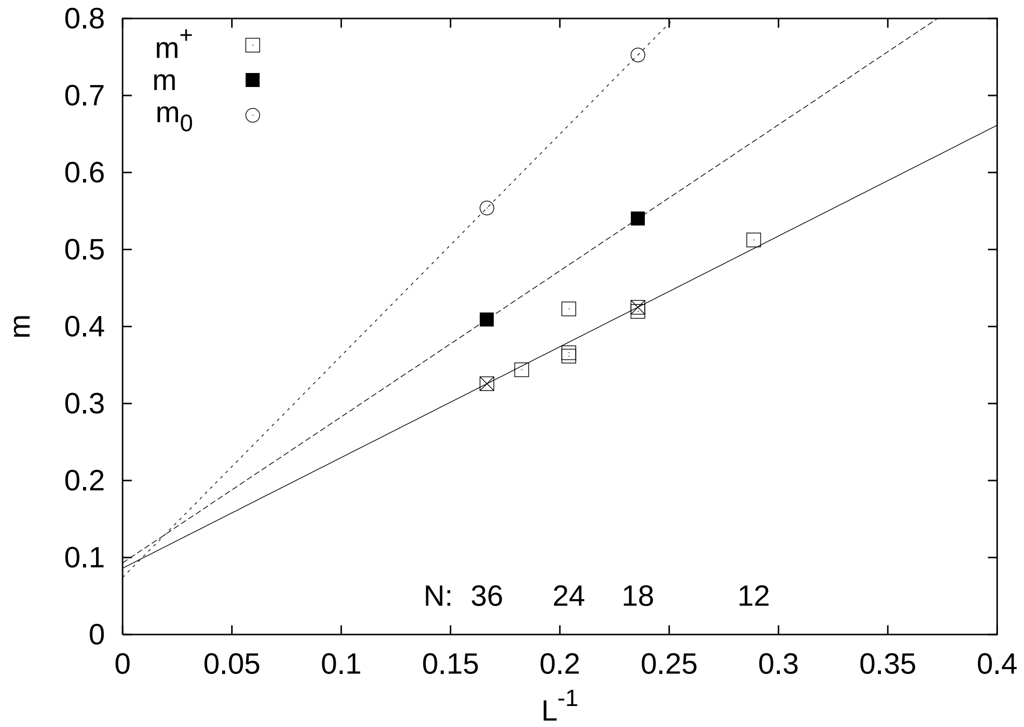


Abbildung 4.31: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Zellen auf dem T4H-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Kreuze markieren die Gitterzellen mit zur drei-Untergitter-Struktur passenden Randbedingungen.

Die wenigen berechneten Gitterzellen lassen keinen Schluß auf das Vorhandensein einer magnetischen Anregungslücke zu. Zwischen Grundzustand und erster magnetischer Anregung findet man keine oder nur einzelne nichtmagnetische Anregungen. Abbildung 4.30 zeigt die Energiespektren für drei verschiedene Gitterzellen. Die niedrigsten Zustände der p6m-symmetrischen Gitterzelle haben zum geordneten klassischen Grundzustand passende Symmetrien. Sie sind invariant unter C_6^2-Rotation, symmetrisch oder antisymmetrisch unter Inversion und lassen sich einem der **k**-Punkte $\mathbf{Q}_0 = (0, 0)$ oder $\mathbf{Q}_1 = (4\pi/3, 0)$ zuordnen. Sie liegen wie bei den bisher betrachteten geordneten Gittern in guter Näherung auf einer Parabel. Für die Gitterzelle $N = 24$ mit nicht zum klassischen Zustand passenden Randbedingungen (kein Punkt $\mathbf{Q}_1 = (4\pi/3, 0)$ in der Brillouin-Zone) treten Abweichungen von dieser Parabel auf.

Die Extrapolation der absoluten Magnetisierung m^+ (Anhang A), dargestellt in Bild 4.31, führt auf einen sehr kleinen aber endlichen Wert von $m^+ = 0.086$. Die aus den Systemen $N = 18$ und $N = 36$ extrapolierte staggered Magnetisierung (siehe Anhang A) ist $m = 0.093$ und damit deutlich kleiner als der Wert $m = s - 0.346 = 0.154$ aus linearer Spinwellentheorie [100]. Eine variationelle Methode [100] liefert einen deutlich höheren Wert von $m = 0.380$, der sich durch Überschätzung der Ordnung erklären läßt. Folgt man dem Trend der Magnetisierung des HAFM auf den anderen bereits vorgestellten Gittern, so sollte der mit $N = 18$ und $N = 36$ ermittelte Wert eher eine Obergrenze darstellen. Mit so kleinen Systemen (3 Einheitszellen) lassen sich jedoch keine zuverlässigen Aussagen für den thermodynamischen Limes treffen.

Die extrapolierte Energie von $E/N = -0.534$ stimmt relativ gut mit der Energie aus linearer

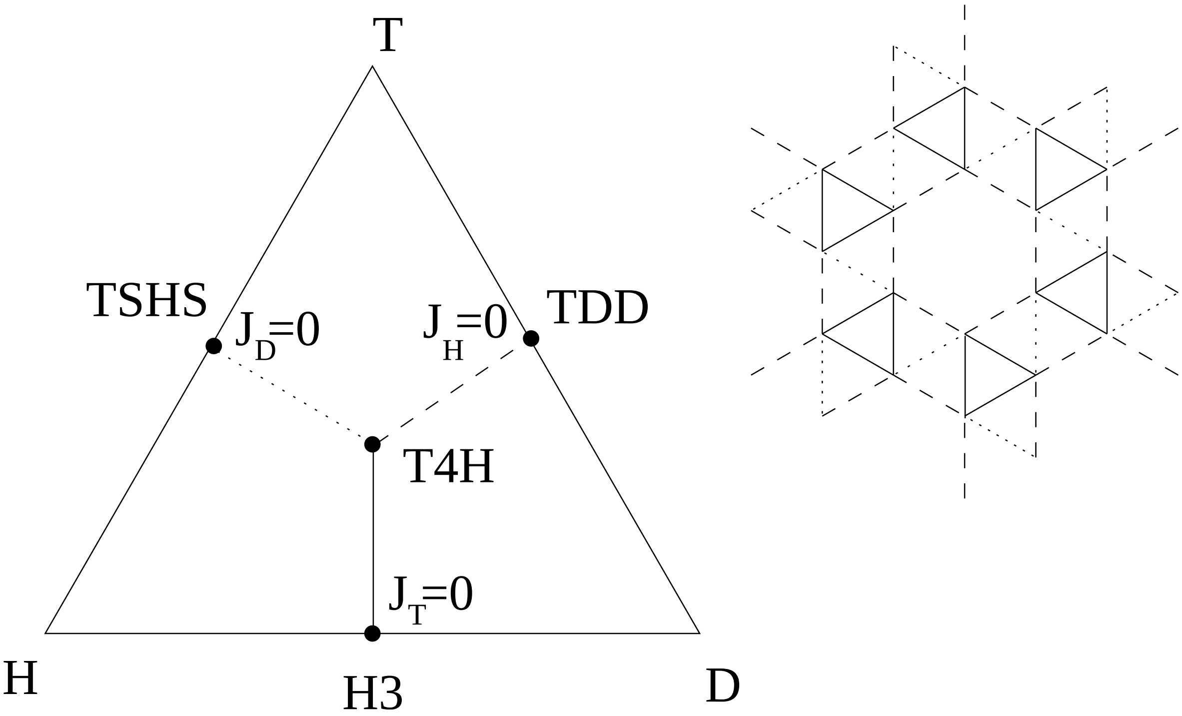


Abbildung 4.32: Parameterraum des T4H-Gitters. Durch Variation der Kopplungen J_T, J_H, J_D lassen sich weitere zweidimensionle Gitter generieren. Im Zentrum findet man den T4H-Fall $J_T = J_H = J_D = 1$. Die obere Ecke T steht für den Fall einzelner Dreiecke $J_T = 1$, $J_D = J_H = 0$. Die rechte untere Ecke D steht für den Fall einzelner Paare (Dimere) $J_D = 1$, $J_T = J_H = 0$. Die linke untere Ecke H steht für den Fall einzelner Sechsecke $J_H = 1$, $J_T = J_D = 0$. Auf den Mittelpunkten der Seiten findet man die Fälle H3: Honigwabengitter mit $J_T = 0$ und $J_H = J_D = 1$, TSHS: 3.4.6.4-Gitter mit $J_D = 0$ und $J_T = J_H = 1$ und TDD: 3.12^2-Gitter mit $J_H = 0$ und $J_T = J_D = 1$.

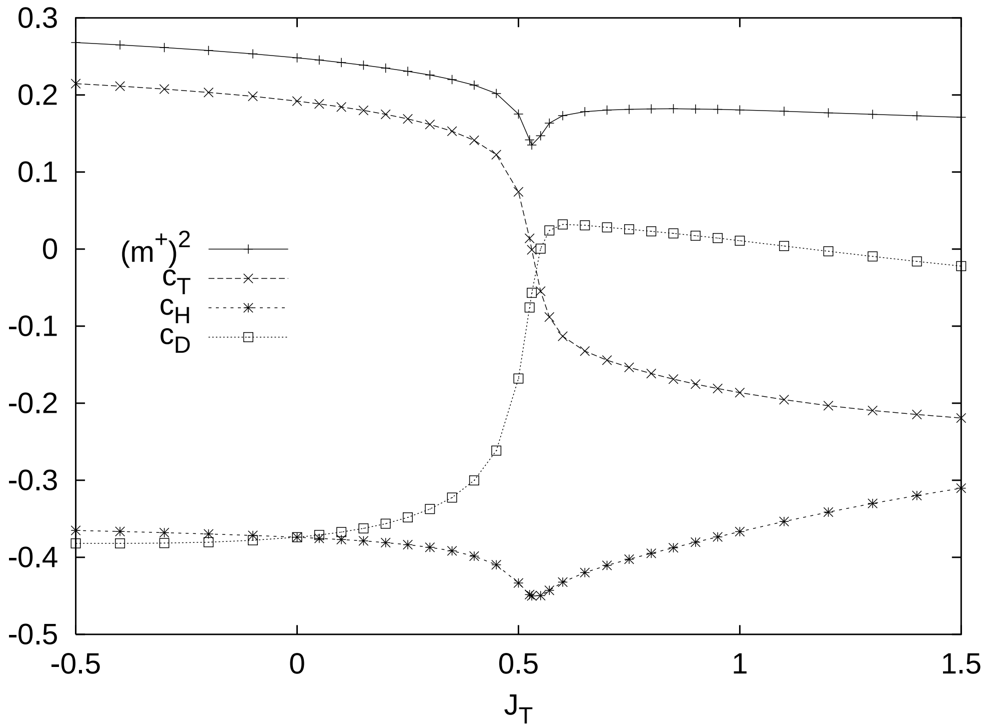


Abbildung 4.33: Darstellung der drei verschiedenen Nachbarkorrelationen und dem Quadrat der totalen Magnetisierung für den HAFM auf einer p6m-symmetrischen T4H-Gitterzelle mit $N = 18$ und J_T als Parameter. Zwischen dem T4H-Fall mit $J_T = 1$ und dem Honigwabengitter-Fall mit $J_T = 0$ gibt es einen Bereich bei $J_T \approx 0.505$, wo sich die Struktur des Grundzustandes ändert.

Spinwellentheorie [100] $5E/(2N) = -0.5464106s^2 - 0.13652065s = -0.2049$ pro Bindung beziehungsweise $E/N = -0.5123$ pro Spin überein. Die variationelle Methode [100] liefert einen etwas höheren Wert von $E/N = -0.4970(5)$.

Parametrisiert man die Stärke der Nachbarbindungen, so lassen sich Übergänge zum Honigwaben–, zum TSHS– und zum TDD–Gitter bilden. Ersteres entsteht, wenn die Dreiecke zwischen den Sechsecken verschwinden ($J_T = 0$), das TSHS-Gitter, wenn die Diagonalbindungen zwischen den Sechsecken entfernt werden ($J_D = 0$) und das TDD-Gitter, wenn die Bindungen entlang der Hexagone entfernt werden ($J_H = 0$). Abbildung 4.32 zeigt eine Übersicht über den durch die drei Parameter J_T, J_H und J_D aufgespannten Parameterraum. Bild 4.33 zeigt verschiedene Nachbarkorrelationen bei Variation von J_T. Während sich die Korrelation c_H nicht wesentlich ändert und im gesamten Bereich in der Größenordnung der Nachbarkorrelation des Honigwabengitters bleibt, weisen c_T und c_D auf eine größere strukturelle Umordnung des Grundzustandes hin. So wird c_T vom ferromagnetischen Wert (übernächste-Nachbar-Kopplung beim Honigwabengitter) zu einem antiferromagnetischen Wert gezwungen. Der Übergang erfolgt relativ abrupt bei $J_T \approx 0.505$. Der dazu analoge Phasenübergang im klassischen System zwischen den Phasen mit $\alpha_T = 0$ und $\alpha_T = 2\pi/3$ erfolgt bei $J_T = 1 - 1/\sqrt{3} \approx 0.42265$.

Wie schon in [101] erwähnt, besitzt das Heisenbergmodell auf dem T4H-Gitter einen exakten Eigenzustand. Dieser Eigenzustand ist ein Produktzustand aus Singuletts (ähnlich dem orthogonalen Dimerzustand im Shastry-Sutherland-Modell oder der Dimer-Plaketten-Kette), die aus den mit J_D verbundenen Spins bestehen. Vergrößert man J_D, so wird dieser Eigenzustand bei $J_D \approx 1.5$ Grundzustand des Systems (siehe auch Abbildung 4.48). J_D treibt im Quantenfall somit einen Phasenübergang erster Ordnung. Im klassischen AFM dagegegen, treibt die Vergrößerung von J_D keinen Phasenübergang. Der optimale Winkel für den klassischen Grundzustand δ aus Tabelle 4.4 (zweite Zeile) ist

$$\begin{aligned} J_D < 4J_H: &\quad \delta = \arctan\left(\frac{\sqrt{3}J_D}{J_D - 4J_H}\right) + \pi \\ J_D = 4J_H: &\quad \delta = \frac{\pi}{2} \\ J_D > 4J_H: &\quad \delta = \arctan\left(\frac{\sqrt{3}J_D}{J_D - 4J_H}\right). \end{aligned} \tag{4.11}$$

Die Korrelation $c_D(J_D)$ wechselt im Fall des klassischen AFM bei $J_D = 1$ ihr Vorzeichen und wird bei $J_D > 2$ die dominierende (größter Betrag) Korrelation. Die Korrelation zwischen benachbarten Spins eines Sechseckes c_H ist bei $J_D = 0$ minimal und wird ab $J_D > 2$ die betragsmäßig kleinste Korrelation. Der quantenmechanische Fall (Abbildung 4.48) zeigt abgesehen vom Phasenübergang bei $J_D \approx 1.5$ ein qualitativ ähnliches Bild.

4.4.4 Der HAFM auf dem Trellis-Gitter

Diese Gitterstruktur aus Bild 4.34 wird in der Literatur auch “Trellis”-Gitter[12] [102] genannt. Das Trellisgitter besitzt cmm-Symmetrie, das heißt es hat orthogonal aufeinanderstehende Spie-

[12] Trellis (engl.) bedeutet Gitter. Oft wird ein an Hauswänden angebrachtes Klettergerüst für Pflanzen so genannt. Diese hat oft die Form der hier untersuchten Struktur und ist damit vermutlich der Namensgeber.

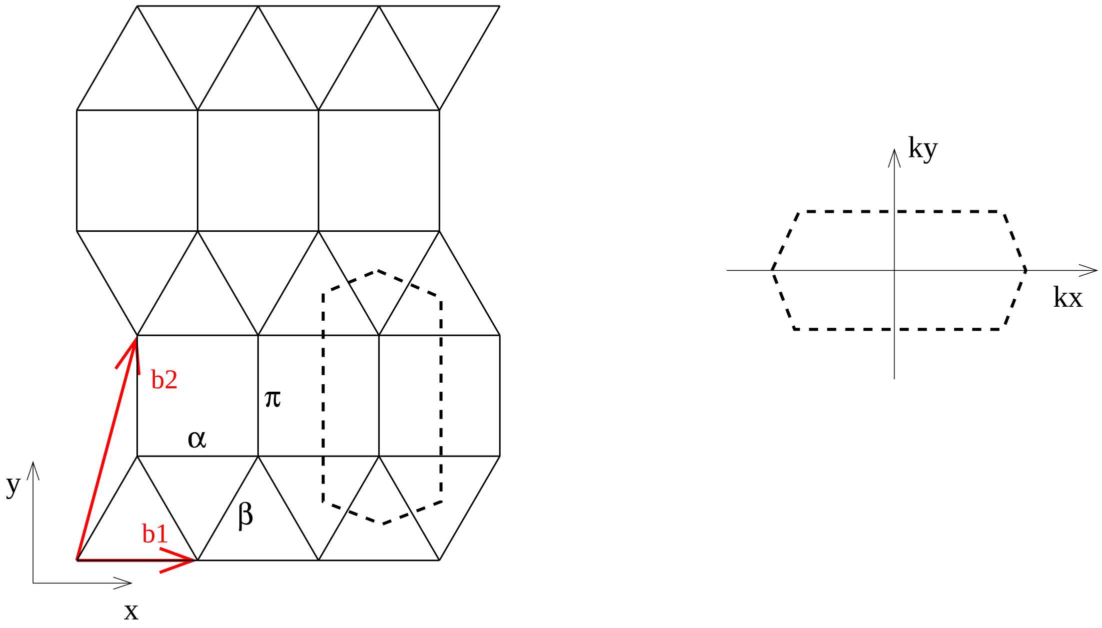


Abbildung 4.34: Wigner-Seitz-Zelle (links) und Brillouin-Zone (rechts) für das Trellis-Gitter (gestrichelt). Im klassischen Grundzustand ordnen sich die Spins entlang der Zick-Zack-Ketten in einer spiralförmigen Struktur mit irrationaler Wellenlänge $2\pi/\alpha$. Damit ist die magnetische Elementarzelle in x-Richtung unendlich ausgedehnt. In y-Richtung ist die magnetische Elementarzelle doppelt so groß, wie die geometrische Zelle. Es gibt drei verschiedene Bindungstypen J_i, die durch ihren Index α, β und π links im Bild hervorgehoben sind.

gelachsen und orthogonal aufeinander stehende Gleitspiegelachsen. An den Kreuzungspunkten der Spiegelachsen beziehungsweise Gleitspiegelachsen liegen Inversionszentren.

Der HAFM auf dem Trellis-Gitter dient als Modell für $SrCu_2O_3$ und CaV_2O_5 [102]. Für den klassischen AFM auf diesem Gitter sind die Spins entlang der Dreiecksketten in einer spiralförmigen Welle mit inkommensurablen Wellenvektor (d.h. der Wellenvektor paßt nicht zu endlichen Gitterzellen mit periodischen Randbedingungen) angeordnet. Da die Dreiecksketten nur über nichtfrustrierende Bindungen gekoppelt sind, ist der klassische Grundzustand identisch mit der Zick-Zack-Kette, wobei die benachbarten Spins verschiedener Zick-Zack-Ketten um jeweils π gedreht sind. Benachbarte Spins entlang der Kettenachse sind um jeweils $\alpha = 2\arccos(\gamma/4)$ und Spins entlang der Zick-Zack-Bindungen sind um $\beta = \pi + \alpha/2$ gedreht. Der Parameter γ beschreibt das Verhältnis der Zick-Zack-Kopplungen zu den Längskopplungen und ist im Falle gleicher Bindungsstärken gleich eins. Der klassische Grundzustand bricht die Translationssymmetrie des Trellisgitters in x-Richtung. In y-Richtung wiederholt sich die Spinstruktur alle zwei Einheitszellen. In diesen Eigenschaften unterscheidet sich der klassische Grundzustand wesentlich von denen auf den anderen bisher betrachteten Gittern.

Setzt man eine der drei Bindungstypen J_α, J_β oder J_π gleich Null so erhält man die Grenzfälle Honigwabengitter, eindimensionale Leitern oder Zick-Zack-Ketten. Da die quantenmechanischen Korrelationen des HAFM auf dem Trellis-Gitter mit den klassischen vergleichbar sind, liegt der Schluß nahe, daß auch der quantenmechanische Grundzustand mit der magnetischen Ordnung des klassischen AFM der Zick-Zack-Kette beschreibbar ist. Auch Schwinger-Boson-Rechnungen und lineare Spinwellenresultate am gleichen Modell jedoch mit variablen Kopplungsstärken [103] zeigen einen langreichweitig, spiralig geordneten Grundzustand für den Fall gleicher Kopplungsstärken.

Die in den Abbildungen 4.35 dargestellten Spektren für endliche Gitterzellen weisen ebenfalls typische Anzeichen von Ordnung auf. So liegen die niedrigsten Zustände gut separiert von den weiteren Anregungen. Auch die Symmetrie der tiefliegenden Zustände wird verständlich, wenn man von einem spiralig geordneten Grundzustand ausgeht und berücksichtigt, daß sich der Winkel α zweier benachbarter klassischer Spins auf endlichen Gittern den aufgezwungenen Randbedingungen anpassen muß. Für den Fall endlicher Systeme weicht dieser Winkel mehr oder weniger stark von $2\arccos(1/4)$ ab. Für die Spektren wurden daher Randvektoren gewählt, die einen klassischen Grundzustand mit $\alpha \approx 2\arccos(1/4) = 0.83914\pi$ haben. Das System mit $N = 20$ Plätzen hat die Randvektoren (5,0) und (-1,2) in Einheiten von ($\mathbf{b}_1$,$\mathbf{b}_2$) aus Abbildung 4.34. In diesem Fall sind $\alpha = 4\pi/5 = 0.8\pi$ und $\beta = 7\pi/5$, das heißt sie weichen um ca. 5% vom inkommensurablen Wert ab. Die Energie des klassischen Grundzustandes für $N = 20$ ist $E/N = -1.618034$, wogegen für den thermodynamischen Limes $N \to \infty$ die Energie $E/N = -1.625$ ist. Das System mit $N = 24$ Plätzen hat die Randvektoren (12,0) und (2,1). Zwar hat diese Gitterzelle eine niedrigere Energie $E/N = -1.619011$ und $\alpha = 5\pi/6 = 0.83333$ ist nur 1% vom inkommensurablen Wert entfernt, dafür ist die Symmetrie in y-Richtung gebrochen und benachbarte Spins entlang der Leitersprossen haben Korrelationen die von minus eins abweichen. Die Randvektoren des links unten in Abbildung 4.35 dargestellten Spektrums sind (6,2) und (-1,2). Die klassische Grundzustandsenergie dieser Gitterzelle ist $E/N = -1.623489802$ und die Winkel zwischen benachbarten Spins sind $\alpha = 6\pi/7 = 0.85714\pi$ und $\beta = 10\pi/7$ und weichen um ca. 2% vom inkommensurablen Winkel ab.

Für die cmm-symmetrischen Gitterzellen paßt die Symmetrie der quantenmechanischen Grundzustände zum klassischen Grundzustand. So findet man für $N = 28$ den Grundzustand im

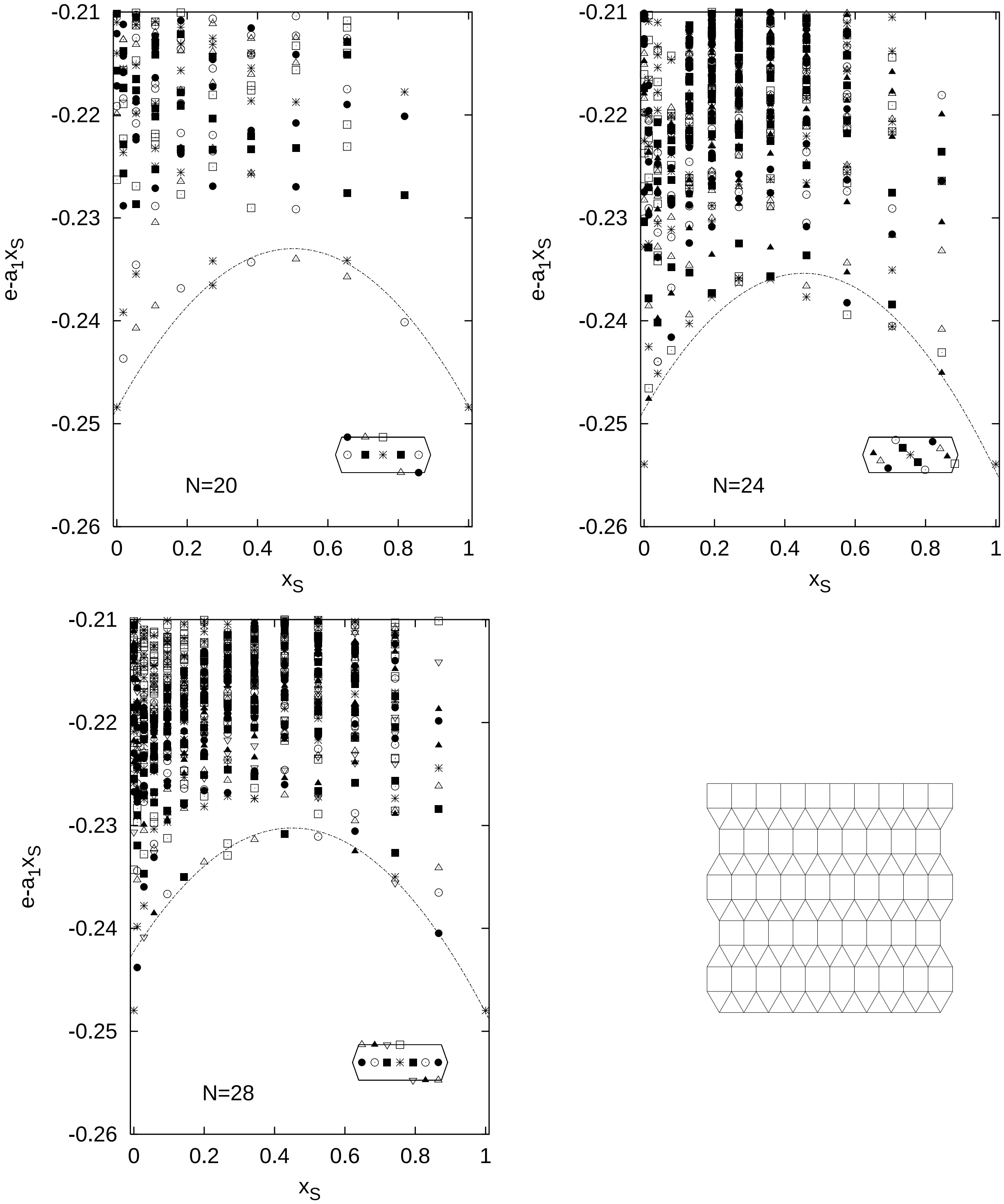


Abbildung 4.35: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen $4^2.3^3$-Gittern. Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

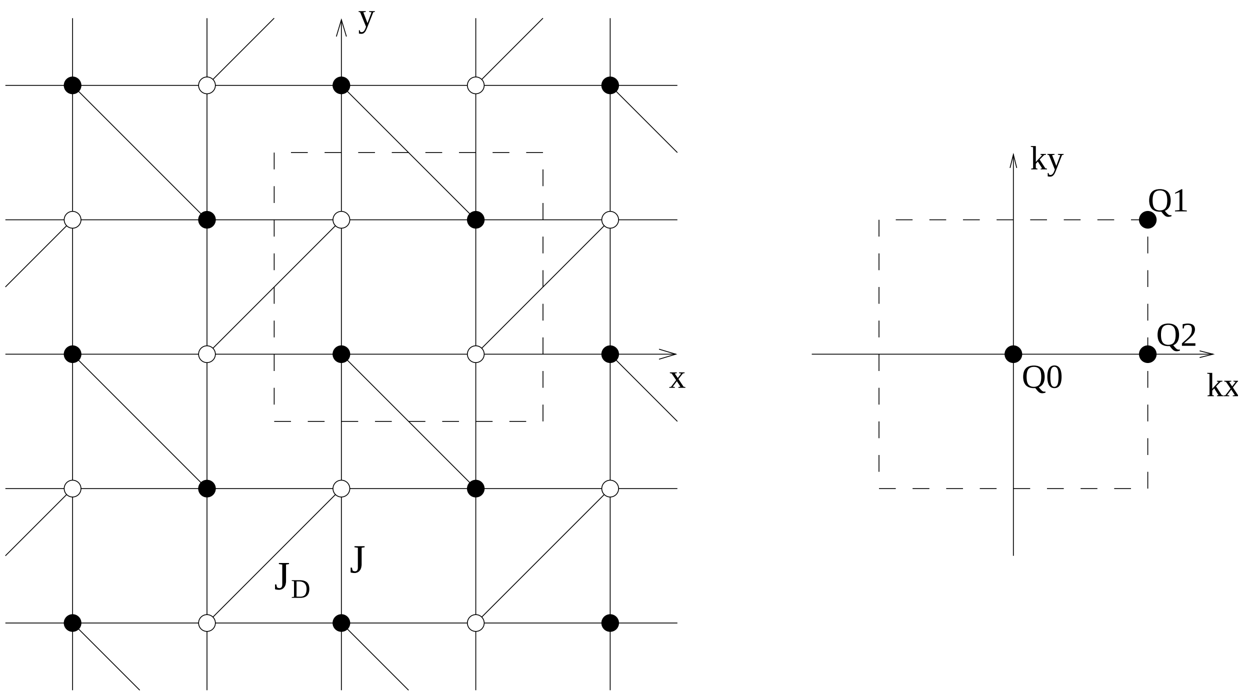


Abbildung 4.36: Wigner-Seitz-Zelle (links, gestrichelt) und Brillouin-Zone (rechts) für das Shastry-Sutherland-Gitter. Der klassische Grundzustand ist Néel-geordnet (helle und dunkle Punkte). Die magnetische Einheitszelle stimmt mit der geometrischen überein.

Unterraum des totalen Spins S die Wellenzahl $k_x = 6\pi(N/2 - S)/7$ und für $N = 20$ die Wellenzahl $k_x = 4\pi(N/2 - S)/5$. Zwischen Grundzustand und erster magnetischer Anregung lassen sich keine nichtmagnetischen Anregungen finden. Insgesamt liefern die Spektren der endlichen Gitterzellen ein zu den geordneten Gittern sehr ähnliches Bild. Die Extrapolation der Grundzustandseigenschaften endlicher Gitterzellen zum thermodynamischen Limes ist jedoch schwierig, da bei periodischen Randbedingungen keine inkommensurable Wellenzahlen realisiert werden. Die Energie des Grundzustandes läßt sich daher nur grob abschätzen und sollte bei $E/N = -0.61(1)$ liegen.

4.4.5 Der HAFM auf dem TTSTS-Gitter

Das TTSTS-Gitter (3^2.4.3.4) ist ein Spezialfall des in Abbildung 4.36 dargestellten Shastry-Sutherland-Gitters [119]. Beim Shastry-Sutherland-Modell unterscheiden sich die diagonalen Austauschintegrale J_D von den horizontalen und vertikalen J. Für den Fall $J_D = J$ erhält man das TTSTS-Gitter in leicht verzerrter Form. Der klassische Grundzustand für den AFM auf diesem Gitter ist Néel-geordnet. Für $J_D > J$ erhält man im klassischen Fall helikale Ordnung [119] mit einem Winkel von $\theta = \pi \pm \arccos(J/J_D)$ zwischen nächsten Nachbarn. Wegen der vier möglichen Ausrichtungen der Helix ist dieser Zustand neben der trivialen kontinuierlichen Entartung vierfach diskret entartet.

Seinen Bekanntheitsgrad erlangte das Shastry-Sutherland-Modell dadurch, daß ein Eigenzustand exakt bestimmbar ist, der für $J_D \gtrsim 2J$ Grundzustand des Systems ist. Für kleine J_D ist der

Grundzustand auch im Quantenfall Néel-geordnet [119, 120]. Der Fall $J_D = 0$ liefert das Quadratgitter. Die Popularität dieses Modells erhöhte sich später, als quasi-zweidimensionale Spin-Gap-Materialien ($Na_2Ti_2Sb_2O$ und $SrCu_2(BO_3)_2$) entdeckt wurden, die sich teilweise durch das modifizierte Shastry-Sutherland-Modell (mit übernächster Nachbarkopplung J_3) beschreiben lassen und die Magnetisierungsplateaus als Funktion vom magnetischen Feld h zeigen [121, 122].

Das TTSTS-Gitter ist p4g-symmetrisch. Im Unterschied zu den p4g-symmetrischen Gittern (Quadratgitter und CaVO-Gitter) liegen die vierzähligen Rotationsachsen auf den Schnittpunkten von Gleitspiegelachsen. In Abbildung 4.36 (links) liegt eine der Rotationsachsen im Zentrum der eingezeichneten Wigner-Seitz-Zelle. Zwei Gleitspiegelachsen verlaufen diagonal durch die Ecken der in Bild 4.36 dargestellten Wigner-Seitz-Zelle, zwei weitere entlang der horizontalen und vertikalen Kopplungen. Die Spiegelachsen verlaufen entlang der in Bild 4.36 eingezeichneten diagonalen Kopplungen und die Inversionszentren liegen jeweils in der Mitte dieser diagonalen Kopplungen. Die Schnittpunkte der Spiegelachsen sind nur Inversionszentren.

Das Shastry-Sutherland-Gitter hat eine quadratische Elementarzelle, die vier Plätze enthält. Der klassische Grundzustand hat die gleiche Symmetrie wie das Gitter. Im quantenmechanischen Fall sollten die niedrigsten Zustände daher zu $Q_0 = (0,0)$ gehören. In den Abbildungen 4.37 werden die Energiespektren $E(x_S)$ für drei verschiedene Gitterzellen dargestellt. Sie ähneln den Spektren der quadratischen Gitter und des Honigwabengitters qualitativ. Die Zustände mit den niedrigsten Energien in jedem S-Sektor haben wie erwartet Q_0-Symmetrie. Sie sind außerdem symmetrisch gegen Spiegelung an einer Dimerachse und symmetrisch oder antisymmetrisch unter C_4-Rotation um das Symmetriezentrum. Die anderen Zustände liegen gut separiert von den niedrigsten Q_0-Zuständen darüber.

Das größte hier berechnete System hat $N = 36$ Spins. Die Energie pro Gitterpunkt des Grundzustandes für dieses System ist $E/N = -0.58352475$. Die Spinpaarkorrelation zwischen nächsten Nachbarn entlang der Bindung J ist $\langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.110962$ und damit etwa 2% geringer als beim gleich großen Quadratgitter ($J_D = 0$, $\langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.113145$, $N = 36$). Die Spinpaarkorrelation entlang der frustrierend wirkenden Bindung J_D ist dagegen mit $\langle S_i^z S_j^z \rangle = 0.054831$ nur halb so stark und im Vergleich zur diagonalen Paarkorrelation zwischen übernächsten Nachbarn im Quadratgitter ($J_D = 0$, $\langle S_i^z S_j^z \rangle = 0.069134$) um etwa 21% reduziert. Das Quadrat der Magnetisierung für das System der Größe $N = 36$ ist $(m^+)^2 = 0.16904824$ und damit etwa 20% kleiner als für das vergleichbare Quadratgitter ($J_D = 0$).

Finite-Size-Skalierung

Mit vier Teilchen je Elementarzelle ist die Finite-Size-Skalierung nur bis Systemgrößen von acht bis neun Elementarzellen möglich. In Abbildung 4.38 ist die Energie des Grundzustandes für verschiedene Systemgrößen und Randbedingungen dargestellt. Im thermodynamischen Limes ergibt sich eine Energie von etwa $E/N = -0.578(5)$. Für eine genauere Abschätzung aus mit exakter Diagonalisierung gewonnenen Daten müssen jedoch größere Gitterzellen berechnet werden. Die Diskrepanz zwischen extrapolierter Grundzustandsenergie und erster magnetischer Anregung gibt einen Eindruck von der Genauigkeit der Abschätzung. Für $N = 36$ konnten nicht alle möglichen Gitterzellen berechnet werden. Die berechnete Gitterzelle mit den Randvektoren $L_1 = (3,0)$ und $L_2 = (0,3)$ in Einheiten der Basisvektoren hat zwar die höchste Zahl der

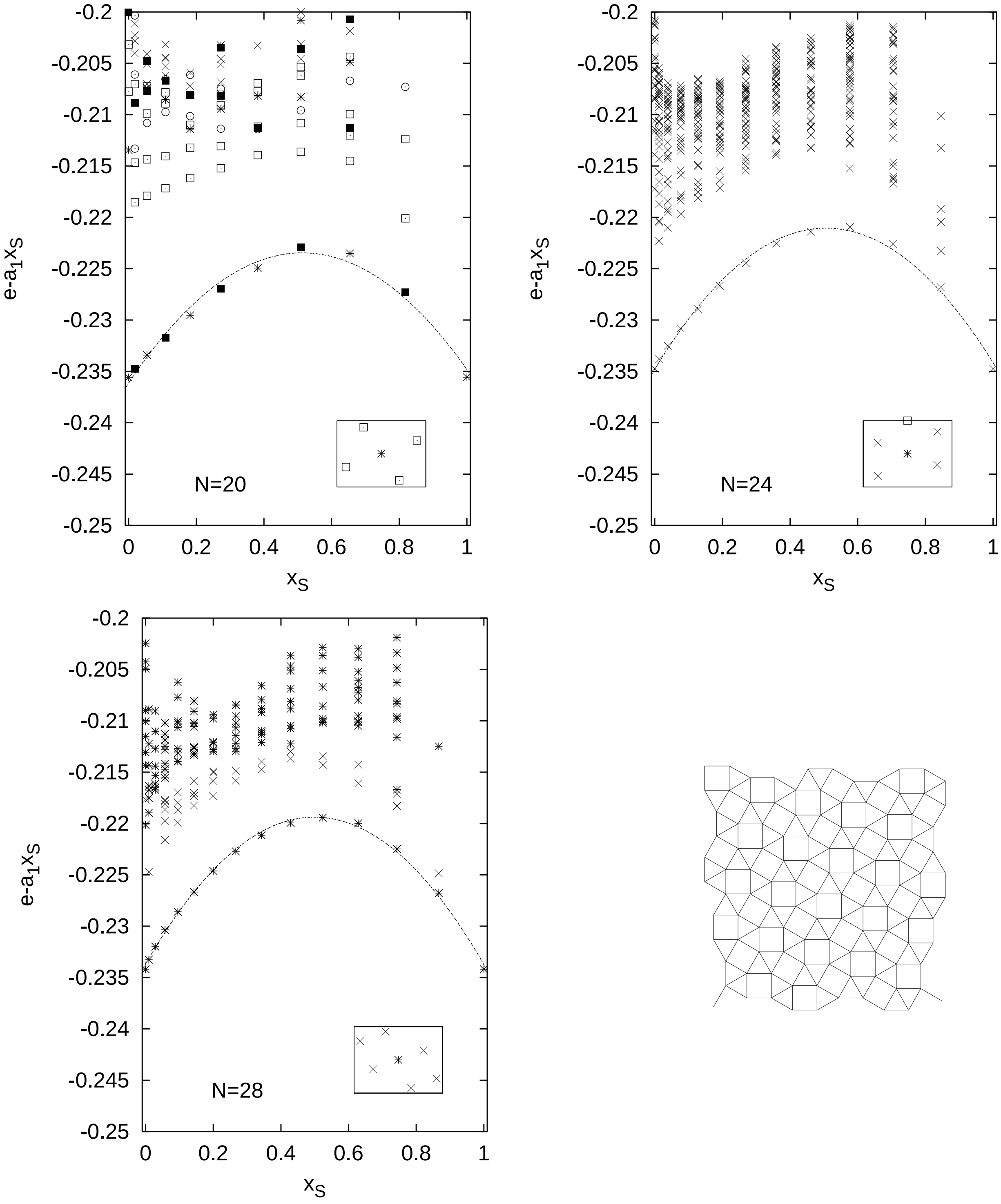


Abbildung 4.37: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen TTSTS-Gittern ($3^2.4.3.4$). Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

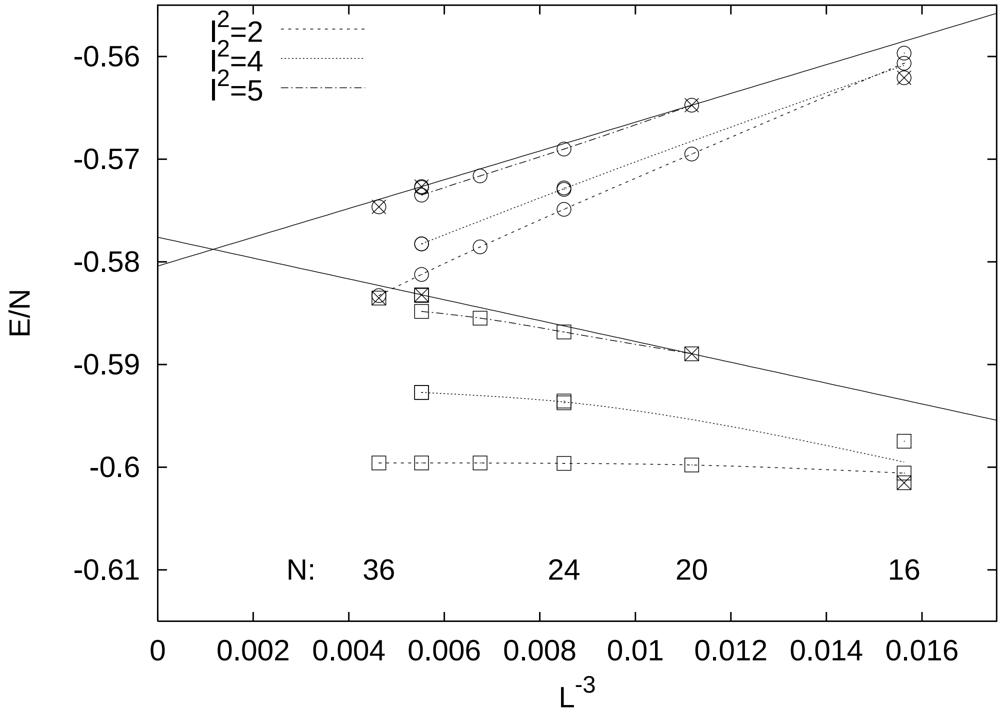


Abbildung 4.38: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(N)$ (Quadrate) und der ersten Anregung $E_1(N)$ (Kreise) des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TTSTS-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Energien der p4g-symmetrischen Gitterzellen sind durch Kreuze hervorgehoben. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4, 5$ (siehe Anhang E.2) haben kleinere Energien. Die durchgezogenen Linien sind lineare Extrapolationen für $S = 0$ und $S = 1$ und für $N = 20, 32$ (vergleiche Text).

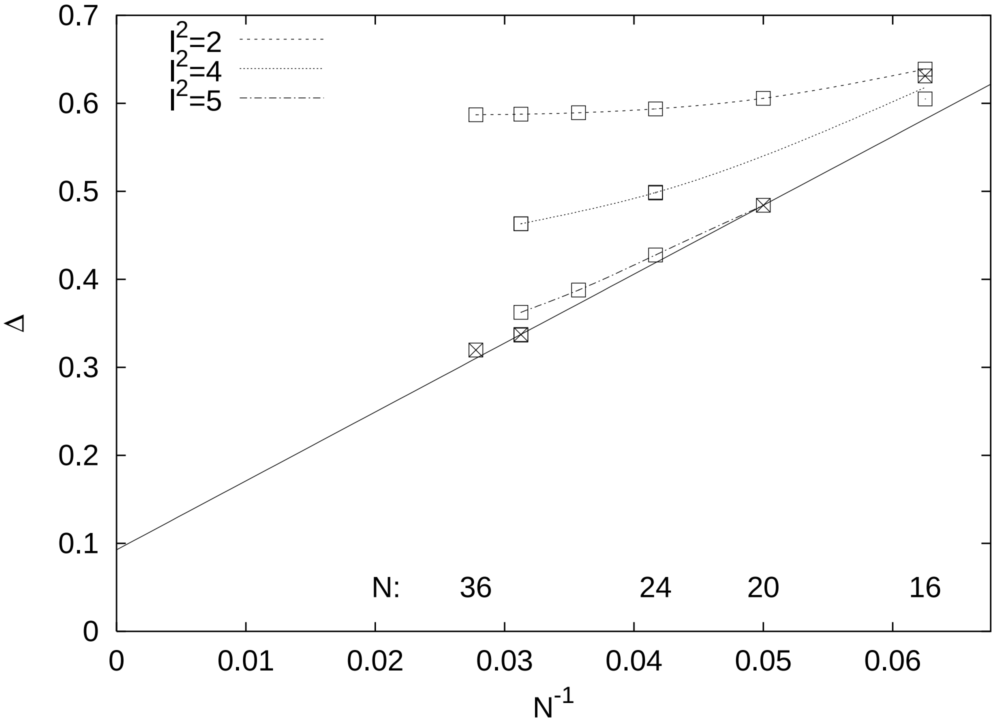


Abbildung 4.39: Magnetische Energielücke (Gap) $\Delta = E_1(N) - E_0(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TTSTS-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Kreuze markieren Gitterzellen mit p4g-Symmetrie. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4, 5$ (siehe Anhang E.2) haben eine größere Energielücke. Die durchgezogene Linie ist eine lineare Extrapolation.

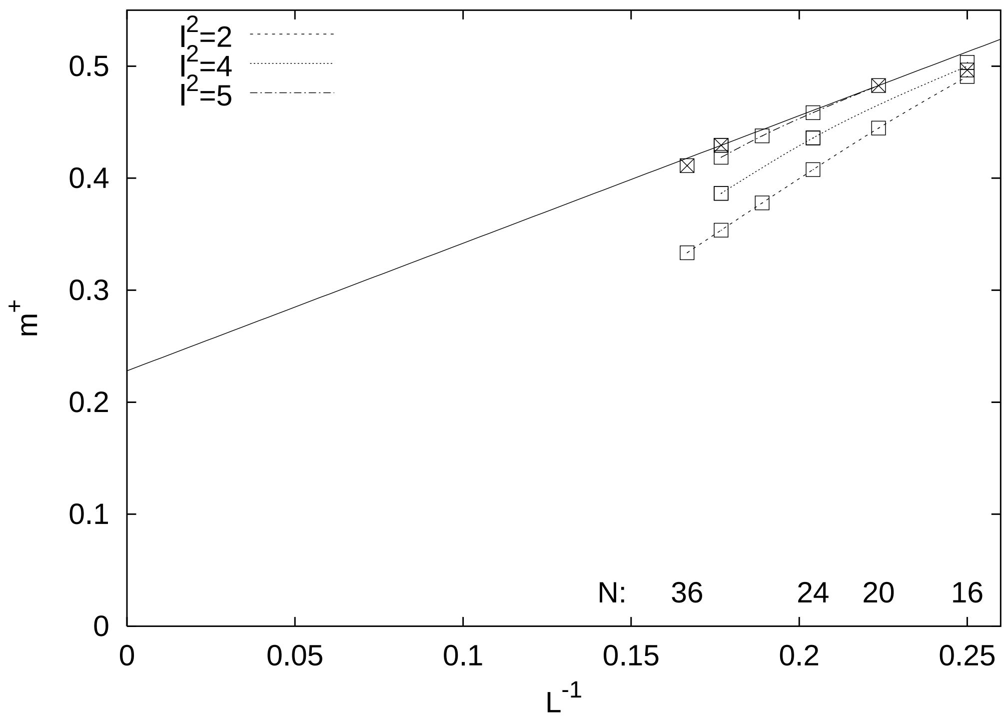


Abbildung 4.40: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TTSTS-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Magnetisierungen der p4g-symmetrischen Gitterzellen sind durch Kreuze hervorgehoben. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4, 5$ (siehe Anhang E.2) haben geringere Magnetisierungen, die im Limes $N \to \infty$ verschwinden. Die durchgezogene Linie ist eine lineare Extrapolation mit den Systemgrößen $N = 20$ und $N = 32$ (vergleiche Text).

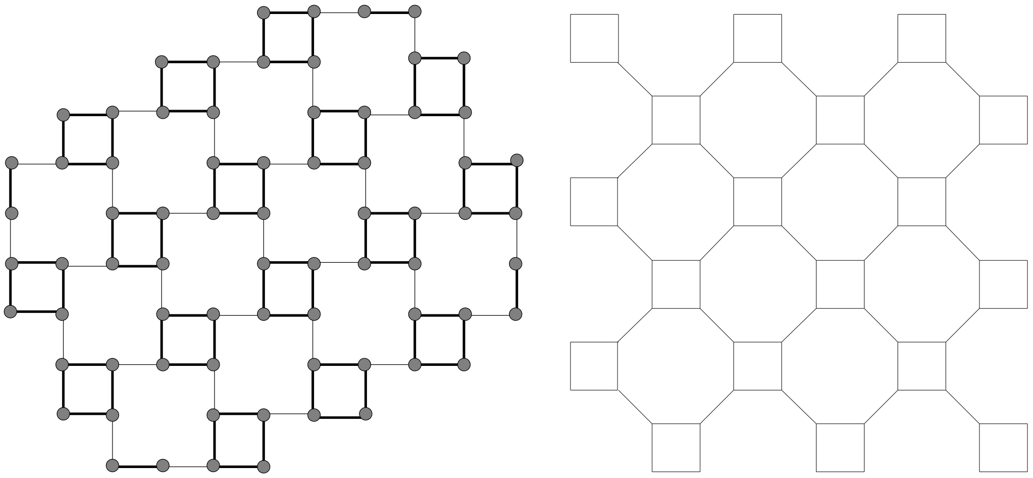


Abbildung 4.41: Anordnung der V^{4+}-Atome (Punkte) in den Ebenen von CaV_4O_9 (links) und das Archimedische Tiling Nummer 11 (rechts). Betrachtet man die Knoten als Spin-1/2-Teilchen, die über die Bindungen (Linien) mit ihren Nachbarn wechselwirken, so sind beide Strukturen äquivalent.

Symmetrien, liefert aber nicht die für die Extrapolation beste Energie, wenn man die beim Quadratgitter vermuteten Kriterien auch hier anwenden kann. Eine bessere Gitterzelle sollte dann eine mit den Randvektoren $L_1 = (1, 3)$ und $L_2 = (0, 9)$ sein. Diese Gitterzelle besitzt jedoch nur ein Viertel der Symmetrien der anderen Gitterzelle und benötigt entsprechend mehr Rechenresourcen (3GB Hauptspeicher). Auch in der Extrapolation der magnetischen Anregungslücke in Abbildung 4.39 sind weitere Rechnungen notwendig, um ein besseres Bild zu bekommen[13]. Die Magnetisierung in Bild 4.40 zeigt relativ deutlich, daß der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem TTSTS-Gitter magnetisch ordnet.

4.4.6 Der HAFM auf dem SOO- oder CaVO-Gitter

Der Name CaVO leitet sich aus einem Vanadat mit quasi-zweidimensionaler Struktur her. Calciumvanadat (CaV_4O_9) war das erste zweidimensionale System, bei dem eine quantenungeordnete Phase beobachtet wurde [140]. Die damit verbundenen kurzreichweitigen Spinkorrelationen führen zu einem Spingap von etwa $\Delta \approx 110K$, die zuerst in der Suszeptibilität [124] und später direkt in Neutronenstreuexperimenten zur Dispersion der Spintriplettanregungen [134] beobachtet wurde. Dieses ungewöhnliche Verhalten hat eine Reihe theoretischer Studien [125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 137, 138, 139, 141] ausgelöst, die hauptsächlich das durch die $s = 1/2$-Spins der Vanadiumatome gebildete Gitter auf dem Heisenbergmodell zum Gegenstand haben. Die Struktur der Ebenen des CaV_4O_9 [135] ist in Bild 4.41 (links) dargestellt. Durch

[13] Es ist kein Widerspruch, wenn in Abb. 4.39 ein positives Gap liefert und Abb. 4.38 ein negatives Gap zeigt. Die niedrigsten Energien für $S = 0$ und $S = 1$ skalieren für Néel-geordnete Systeme nach $E_0(S) = A_0^S + A_1^S L^{-3} + A_2^S L^{-4}$ (Gleichung 4.5), wobei für den thermodynamischen Limes $A_0^0 = A_0^1$ und $A_1^0 = A_1^1$ gilt. Bei der Skalierung des Gaps werden diese Gleichheiten vorrausgesetzt, sie treffen jedoch für endliche Systeme wegen Finite-Size-Effekten nicht unbedingt zu. Die scheinbare Diskrepanz zwischen Abb. 4.39 und Abb. 4.38 läßt sich also durch Finite-Size-Effekte erklären. Bei diesem System tritt sie besonders deutlich in Erscheinung und zeigt, daß die Extrapolation wegen der kleinen Systemgrößen mit entsprechender Ungenauigkeit behaftet ist.

leichte Verzerrung entsteht die SOO-Struktur (4.8^2) in Bild 4.41 rechts. Die CaVO-Struktur aus Bild 4.41 (links) nennt man häufig auch 1/5-verdünntes (engl. depleted) Quadratgitter, da es aus dem Quadratgitter entsteht, wenn man jeden fünften Platz entfernt.

Die geometrische Elementarzelle des SOO-Gitters enthält vier Plätze und hat p4m-Symmetrie. Da das Gitter bipartit ist, ist der Grundzustand des klassischen Spinmodells auf diesem Gitter der Néel-Zustand. Benachbarte klassische Spins sind somit antiparallel ausgerichtet und teilen das Gitter in zwei magnetische Untergitter A und B. Die magnetische Einheitszelle muß dem Rechnung tragen und ist daher doppelt so groß wie die geometrische Einheitszelle. Das Gitter ist in diesen Punkten sehr ähnlich dem quadratischen Gitter, nur die Anzahl der Teilchen pro Elementarzelle ist verschieden.

Die Ähnlichkeit der Energiespektren in Abbildung 4.42 mit denen des Quadratgitters ist daher wenig überraschend. Sie zeigen die üblichen Eigenheiten eines magnetisch langreichweitig geordneten Heisenbergantiferromagneten. So liegen die Zustände mit der kleinsten Energie $E(S)$ deutlich separiert von denen mit höherer Energie. Die Symmetrie der tiefsten Zustände ist $Q_0 = (0, 0)$ für gerade $N/2 - S$ und $Q_1 = (\pi, \pi)$ für ungerade Quantenzahlen $N/2 - S$. Diese Eigenschaft findet man genauso beim Quadratgitter. Sie resultiert aus der halbierten Brillouinzone des magnetisch geordneten Grundzustandes. Neben den Translationssymmetrien sind die niedrigsten Zustände invariant gegen Inversion am Plakettenzentrum und gegen Spiegelung an einer Dimer-Plaketten-Achse.

Da die Spins im SOO-Gitter nur drei nächste Nachbarn besitzen, sollte der Einfluß der Quantenfluktuationen stärker als beim Quadratgitter sein, was zu einer kleineren Magnetisierung m^+ führen sollte. Extrapolation der Gitterzellen $N = 16, 24, 32$ mit günstiger Geometrie führt zu $m^+ = 0.23(1)$. Dieser Wert beruht auf sehr kleinen Gittergrößen und muß mit entsprechender Vorsicht interpretiert werden. Dennoch liefert diese Extrapolation einen Wert, der in der erwarteten Größenordnung liegt und mit etwa zwei Drittel der Magnetisierung des Quadratgitters der kleineren Ordnungszahl $z = 3$ Rechnung trägt.

Extrapolation der Energien endlicher Gitterzellen bis $N = 32$ (Abbildung 4.43) lassen auf eine Energie von etwa $E/N = -0.553(1)$ schließen. In [125] wird das parametrisierte SOO-Modell mit J als Plakettenbindung und J' als Bindung zwischen den Plaketten untersucht. Dabei wird Lineare Spinwellentheorie als auch Störungsrechnung in zweiter Ordnung herangezogen, um den Grundzustand des HAFM auf dem CaVO-Gitter zu beschreiben. Die lineare Spinwellentheorie liefert für $J = J'$ eine Energie von $E/N = -J(3s^2/2 + 0.325248s)$, die für den Fall $s = 1/2$ eine Energie von $E/N = -0.5376$ in Einheiten von J entspricht. Für kleine J' liefert die Störungstheorie zweiter Ordnung um einen Plaketten-Singulett-Zustand eine Energie von $E/N = -(1/2)J(1 + (43/576)(J'/J)^2)$ und nach Einsetzen von $J' = J = 1$ den Wert von $E/N = -0.5373$. Die Störungstheorie zweiter Ordnung nach [125] für das SOO-Gitter liefert in niedriger Ordnung die gleichen Ergebnisse, wie die in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen an der Dimer-Plaketten-Kette. Diese Verwandtschaft war auch die ursprüngliche Motivation für die in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen an der Dimer-Plaketten-Kette. Aus diesen und weiteren Störungsrechnungen zu den magnetischen Anregungslücken schlußfolgern die Autoren von [125], daß der Grundzustand für kleine J' ein plakettenartiger RVB-Zustand (resonating-valence-bond state) mit Anregungslücke und für große J' ein dimerartiger Grundzustand mit Anregungslücke ist. Für mittlere Kopplung $J' \approx J$ gibt es ein kleines Gebiet, wo die Anregungslücken beider Singulettphasen verschwinden und eine Néel-geordneter Grundzustand die

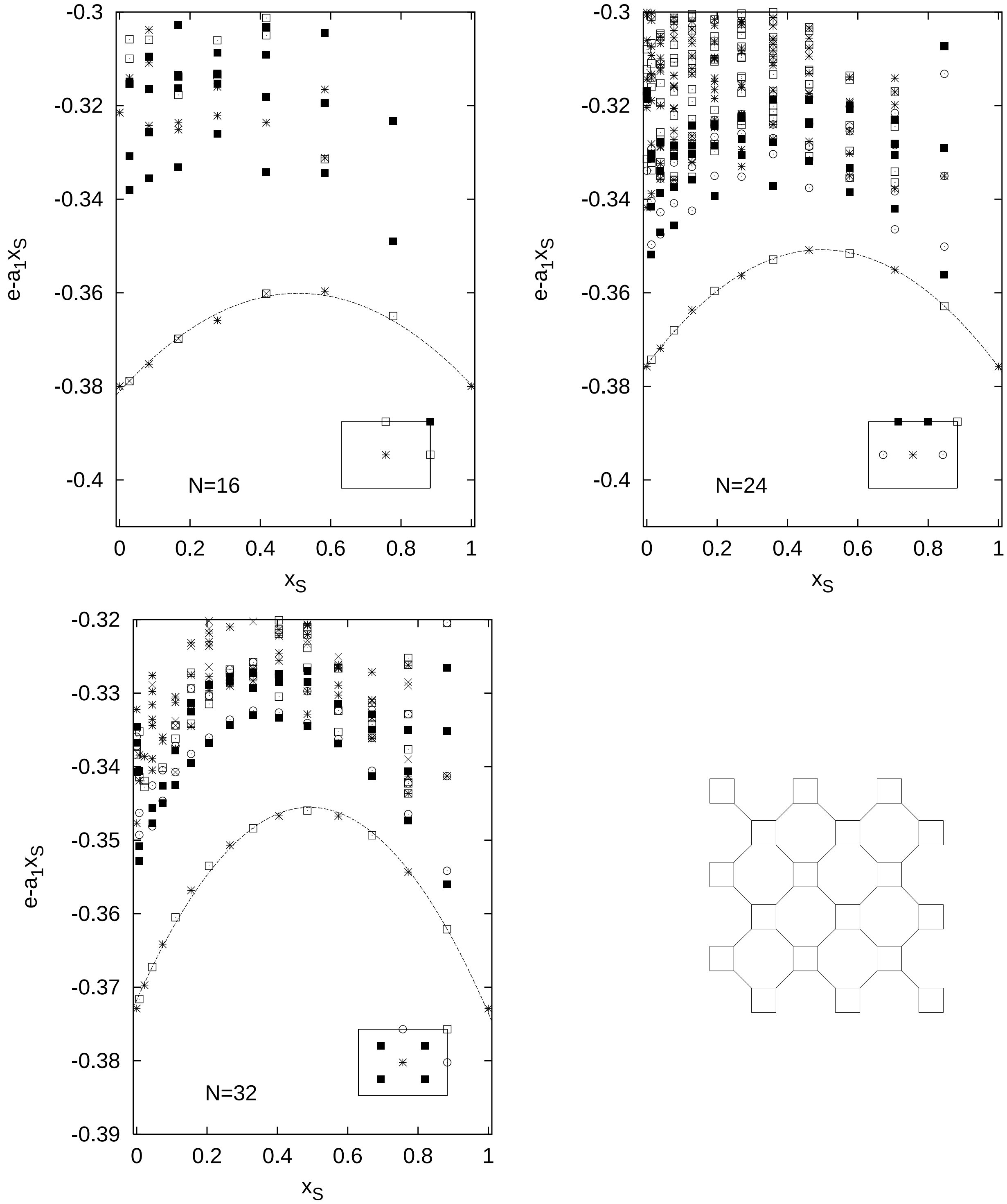


Abbildung 4.42: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen SOO-Gittern. Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

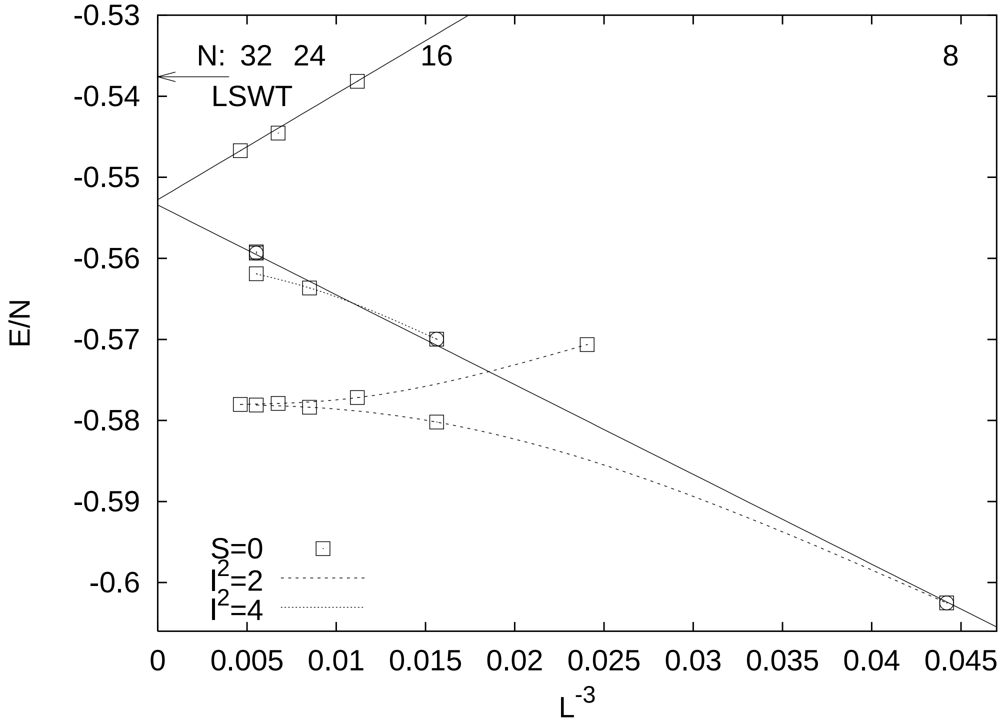


Abbildung 4.43: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(N)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem SOO-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Energien der p4m-symmetrischen Gitterzellen sind durch Kreuze hervorgehoben. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4$ (siehe Anhang E.2) haben kleinere Energien. Die durchgezogenen Linien sind Extrapolationen mit gerader (unten) und ungerader Zahl (oben) von geometrischen Einheitszellen. Zum Vergleich ist das Ergebnis aus linearer Spinwellentheorie (LSWT) dargestellt.

minimale Energie besitzt. Mit der in [128] Gleichung (3) angegebenen Korrektur für Gleichung (6) in [125] für die in Störungstheorie berechneten Anregungslücke ergibt sich der Bereich der Néel-Phase zwischen $J' = 1.008$ und $J' = 1.36612$. Deshalb vermuten die Autoren den Fall $J' = J$ in der plakettenartigen Singulettphase dicht neben der geordneten Néel-phase, halten aber auch eine Verschiebung der Phasengrenzen bei Erweiterung der Störungsrechnungen für möglich, so daß im Fall gleicher Bindungsstärken die Néel-phase Grundzustand ist. Andere Rechnungen [129, 126] zeigen ebenfalls einen geordneten Bereich um $J'/J = 1.25$ von etwas größerer Breite ($J'/J = 0.6 \ldots 2.4$ in [129] und $J'/J = 0.925(25) \ldots 1.67(15)$ in [126]) und bestätigen so die obige Vorstellung qualititativ. Das reale CaVO, in dem weitere frustrierende Bindungen zwischen übernächsten Nachbarn eine Rolle spielen, liegt vermutlich in der Plakettenphase, was das gefundene Spingap erklärt.

Vergleicht man den aus der exakten Diagonalisierungen extrapolierten Wert mit denen der Störungstheorie, so liegt die extrapolierte Energie deutlich tiefer. Berücksichtigt man, daß die nächst höheren Störungsterme die Energien verringern, wird die Übereinstimmung besser. Auch die nächsten Störungsterme in den Anregungsenergien sollten das gapfreie Gebiet zwischen den beiden Singulettphasen verbreitern. In der Tat wird bei Extrapolation der Störungsreihe in [128] ein kritischer Wert von $J' = 0.920$ gefunden, oberhalb dessen der Grundzustand Néel-geordnet ist.

Abbildung 4.43 zeigt neben der Extrapolation von Gitterzellen mit gerader Anzahl von geometrischen Einheitszellen, die eine klassische Néel-Ordnung erlauben, auch eine Extrapolation für Gitterzellen mit ungerader Anzahl geometrischer Einheitszellen (obere Kurve). Beide Extrapolationen stimmen gut überein und zukünftige Rechnungen sollten mit $N = 40$ und $N = 44$ zeigen, ob diese Übereinstimmung auf eine hohe Genauigkeit der Extrapolation deutet oder eher von zufälliger Natur ist. Die Extrapolation der magnetischen Anregungslücke ist in Bild 4.44 dargestellt. Sie sollte für ein magnetisch geordnetes System verschwinden. Die Extrapolation in Bild 4.44 zeigt, daß bedingt durch die Nähe zu den Phasengrenzen ($J' \neq 1$) die zur Extrapolation benutzten Systemgrößen noch deutlich zu klein sind. Größere Systeme und Verwendung weiterer Terme in der polynomialen Extrapolation führen zum Beispiel beim HAFM auf dem Quadratgitter zu kleineren und somit besseren Werten.

Extrapoliert man die Magnetisierung (Abbildung 4.45) der der exakten Diagonalisierung zugänglichen Gitter mit $N = 16$, 24 und 32, so erhält man für den thermodynamischen Limes $m^+ = 0.230(9)$. Dieses Ergebnis stimmt gut mit dem Spinwellenwert aus [125] von $m = 0.212$ überein. Die Reduktion der klassischen Magnetisierung durch Quantenfluktuationen ist somit etwa 50% größer, was der kleineren Anzahl von Nachbarn z Rechnung trägt. Der mit Spinwellentheorie berechnete Wert der Magnetisierung verschwindet unterhalb von $J'/J \approx 1/3$ und oberhalb von $J'/J \approx 4$ [126] und überschätzt die magnetische Ordnung. Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen mit Systemen bis 800 Spins liefern einen kleineren Wert für die Magnetisierung bei $J' = J$ von $m = 0.178(8)$ [126]. Zur Bestimmung dieses Wertes wurde sowohl m als auch m^2 in Abhängigkeit von $N^{-1/2}$ linear extrapoliert. Mit wachsenden Systemgrößen nähert sich der extrapolierte Wert m von oben und der über m^2 extrapolierte Wert von unten dem Punkt $m = 0.178(8)$. Die aus den QMC-Rechnungen extrapolierte Magnetisierung verschwindet unterhalb von $J'/J \approx 0.92$ und oberhalb von $J'/J \approx 1.33$ [126].

In [136] wird ein parametrisiertes CaVO-Gitter beschrieben, das zusätzlich frustrierende Kopplungen enthält. Für den nichtfrustrierten Fall und gleichen Kopplungsstärken ($J_1' = J_1 = J$ in

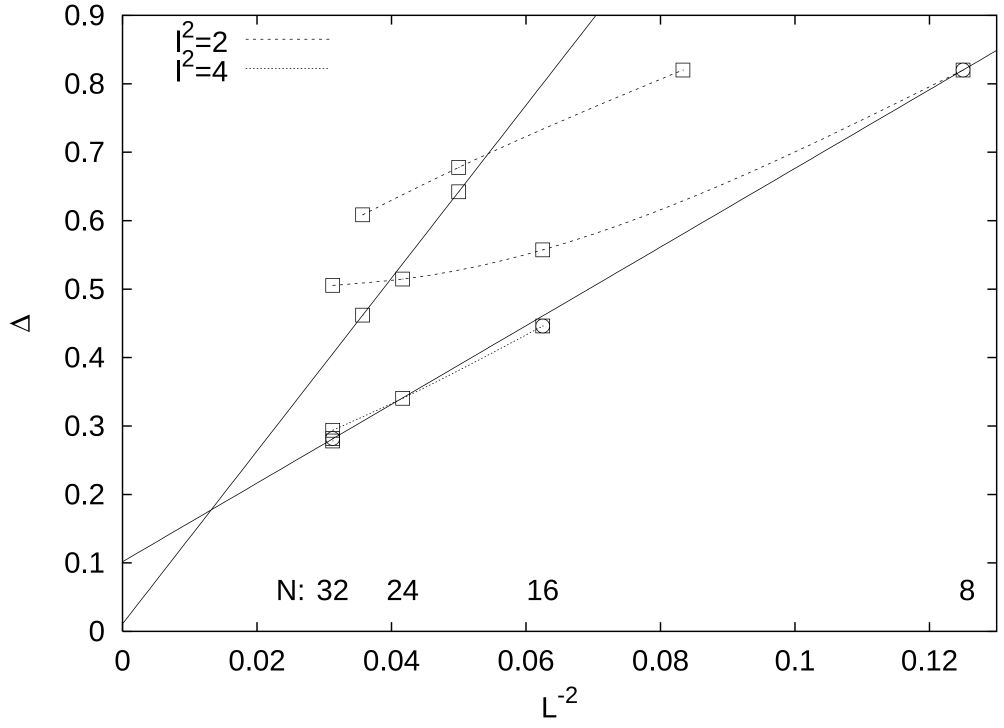


Abbildung 4.44: Magnetische Anregungslücke $\Delta = E_0(S = 1) - E_0(S = 0)$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem SOO-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die p4m-symmetrischen Gitterzellen sind durch Kreuze hervorgehoben. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4$ (siehe Anhang E.2) haben größere Anregungsenergien. Die durchgezogenen Linien sind lineare Extrapolationen mit gerader und ungerader Zahl von geometrischen Einheitszellen.

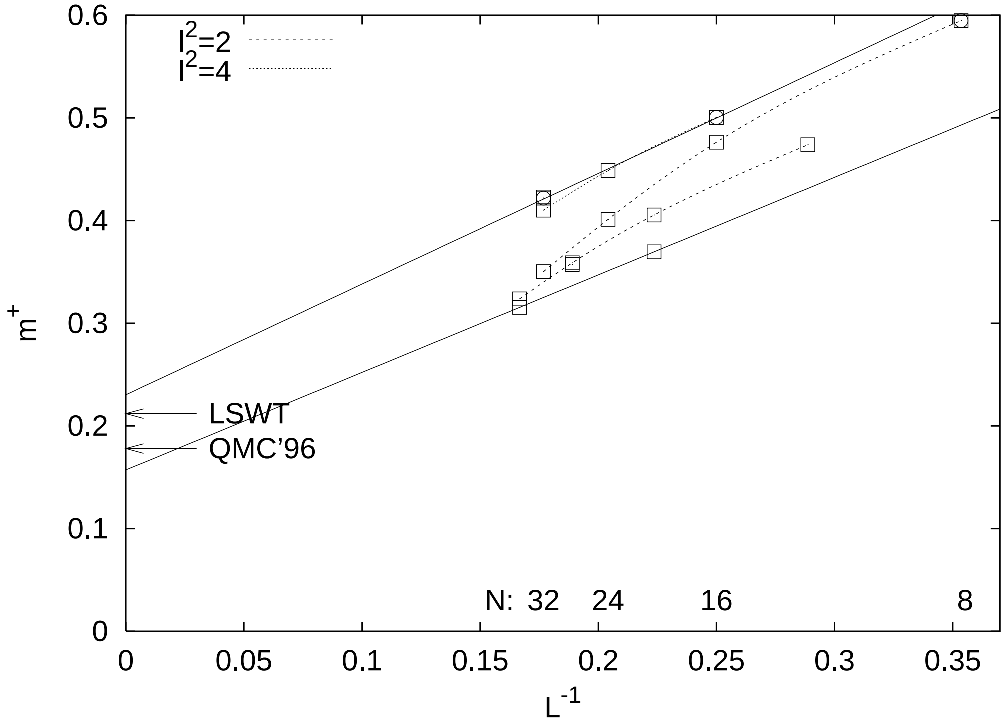


Abbildung 4.45: Magnetisierung m^+ des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem SOO-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die p4m-symmetrischen Gitterzellen sind durch Kreuze hervorgehoben. Gitterzellen mit kurzer Seitenlänge $l^2 = 2, 4$ (siehe Anhang E.2) haben kleinere Magnetisierungen. Die durchgezogenen Linien sind Extrapolationen mit gerader (oben) und ungerader Zahl (unten) von geometrischen Einheitszellen. Zum Vergleich ist das Ergebnis aus linearer Spinwellentheorie (LSWT) und Quanten-Monte-Carlo-Methode (QMC) dargestellt.

[136]) finden die Autoren unter Nutzung einer Mean-field-Schwinger-boson-Näherung ebenfalls einen langreichweitig Néel-artig geordneten Grundzustand. So ergibt sich zusammen mit weiteren Veröffentlichungen ein konsistentes Bild von einem Néel-geordneten Grundzustand für den HAFM auf dem CaVO-Gitter.

4.4.7 Der HAFM auf dem TSHS-Gitter

Dieses Gitter ist eng mit dem T4H-Gitter ($3^4.6$) verwandt. Man erhält dieses Gitter auch als Grenzfall des T4H-Gitters, wenn die Austauschwechselwirkung J_D über die Diagonale zwischen den Sechsecken verschwindet. Dieser Zusammenhang wurde bereits in Abbildung 4.32 dargestellt. Das TSHS-Gitter hat gegenüber dem T4H-Gitter mit zusätzlichen Spiegelebenen und Gleitspiegelebenen eine höhere Symmetrie (p6m statt p6). Damit ist der Hilbertraum für den Heisenberg-Antiferromagneten auf der $N = 36$-Gitterzelle nur halb so groß, wie beim T4H-Gitter. Trotzdem bleibt der Rechenaufwand beachtlich.

Da die im T4H-Gitter vorhandene zusätzliche frustrierende Bindung J_D hier fehlt, und die Korrelation über diese Bindung im T4H-Gitter sehr schwach war, sollte die Ordnung im TSHS-Gitter stärker ausgeprägt sein als beim T4H-Gitter. Vergleicht man zunächst die Korrelationen benachbarter Spins im Grundzustand des klassischen Antiferromagneten, so findet man auf den Dreiecken wieder um $2\pi/3$ gedrehte Spins und auf den verbleibenden Sechseck-Bindungen zwischen nächsten Nachbarn antiparallel gekoppelte Spins. Damit liegt die Energie pro Platz für den klassischen Antiferromagneten tatsächlich unter derjenigen des T4H-Gitters, was man als geringere Frustration deuten kann (Abbildung 4.2 aus Abschnitt 4.2). Die klassische Korrelation c_D zwischen ehemaligen Nachbarn des T4H-Gitters ist für das TSHS-Gitter mit $c_D = 0.5$ (Winkeldiferenz von $2\pi/6$) größer als beim T4H-Gitter ($c_D = 0$ für $J_D = 1$).

In Abbildung 4.46 sind die Energien für den quantenmechanischen Fall mit $s = 1/2$ in Abhängigkeit von der Quantenzahl S für drei verschiedenene Gitterzellengrößen dargestellt. Nur die Systeme mit $N = 18$ und $N = 36$ passen zum klassischen Grundzustand. Die Gitterzellen $N = 18$ und $N = 24$ haben volle p6m-Symmetrie. Das nächst größere System, das zum klassischen Grundzustand paßt und die volle Gittersymmetrie besitzt, hat $N = 54$ Spins. Es ist der exakten Diagonalisierung derzeit noch nicht zugängig. Die Spektren für die Gitterzellen $N = 18$, 24 und 36 sind qualitativ ähnlich zu den Spektren des HAFM auf dem T4H-Gitter. Die gegenüber dem T4H-Gitter fehlende frustrierende Bindung J_D erzeugt jedoch quantitative Abweichungen.

Das größte berechnete System mit $N = 36$ Spins hat nicht die volle Punktsymmetrie des Gitters. Die Energie des Grundzustandes für dieses System beträgt $E/N = -0.57308$ und ist damit etwa 6% niedriger als beim T4H-Gitter. Die Magnetisierung des Grundzustandes für $N = 36$ beträgt $m^+ = 0.11907$. Das sind 12% mehr als beim T4H-Gitter mit $m^+ = 0.10610$. Vergleicht man die Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn für $N = 36$ mit denen des T4H-Gitters, so erhält man für c_T einen betragsmäßig etwas kleineren Wert (der Mittelwert für $N = 36$ ist $c_T = -0.17233$) und für c_H einen betragsmäßig größeren Wert (der Mittelwert für $N = 36$ ist $c_H = -0.40075$).

Da nur eine Gitterzelle mit voller p6m-Symmetrie und passenden Randbedingungen für die klassische Ordnung zur Verfügung steht ($N = 18$), und das System mit $N = 36$ die Gittersymmetrie bricht, ist eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes mit hoher Unsicherheit behaftet. Bild 4.47 zeigt die Extrapolation der Magnetisierung zu $1/L \to 0$ mit $N = L^2$. Sie

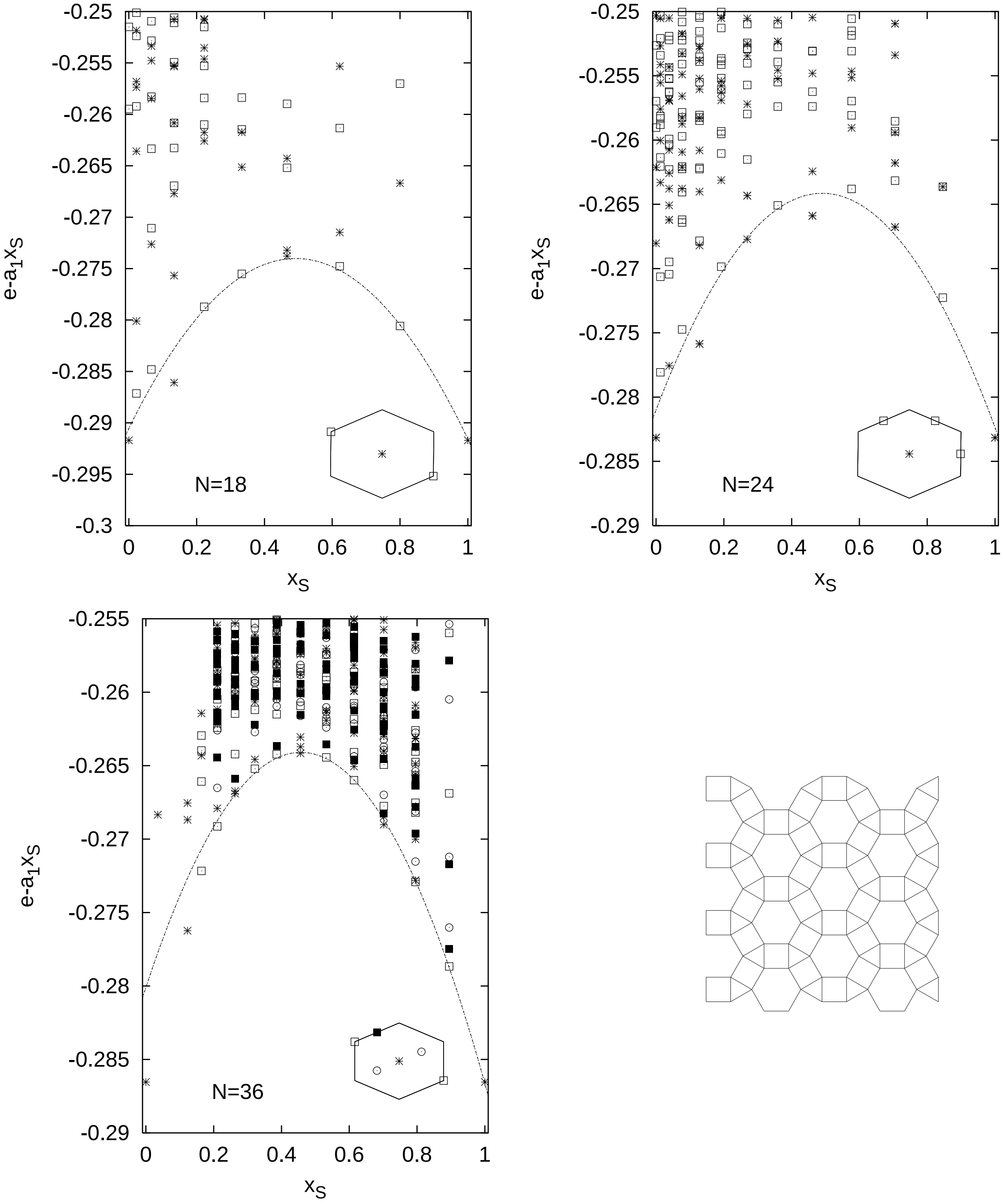


Abbildung 4.46: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen TSHS-Gittern. Zur besseren Übersicht wurde a_1X_S subtrahiert (siehe Anhang C.2). Für $N = 36$ fehlen wegen des hohen Rechenaufwandes die Energien für einige Werte von S.

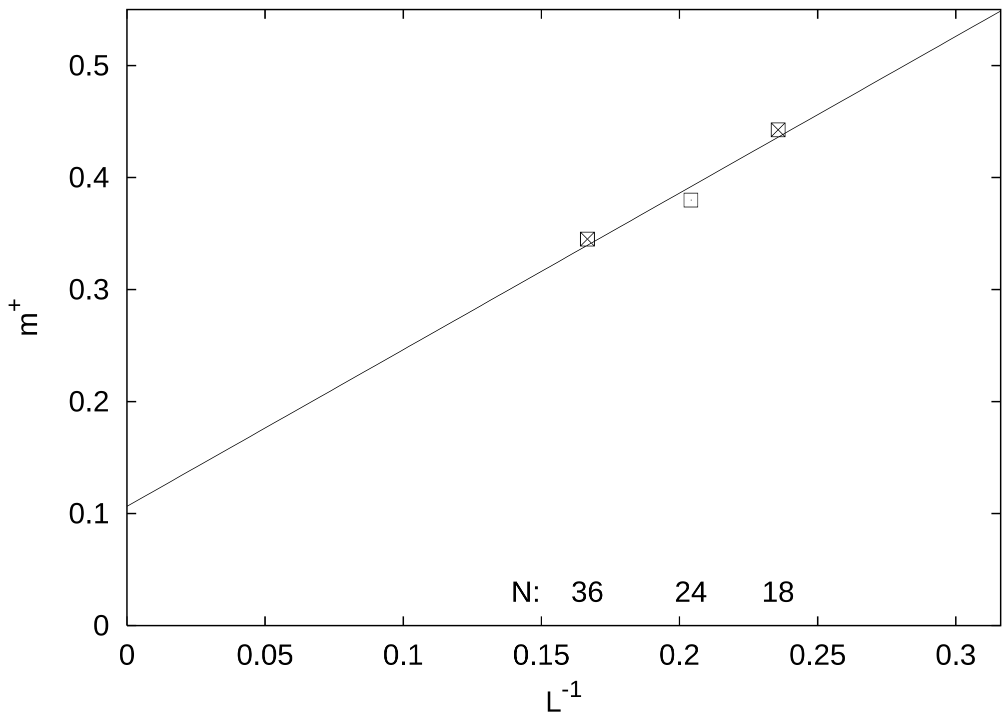


Abbildung 4.47: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Zellen auf dem TSHS-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die Kreuze markieren Gitterzellen mit zur drei-Untergitter-Struktur passenden Randbedingungen.

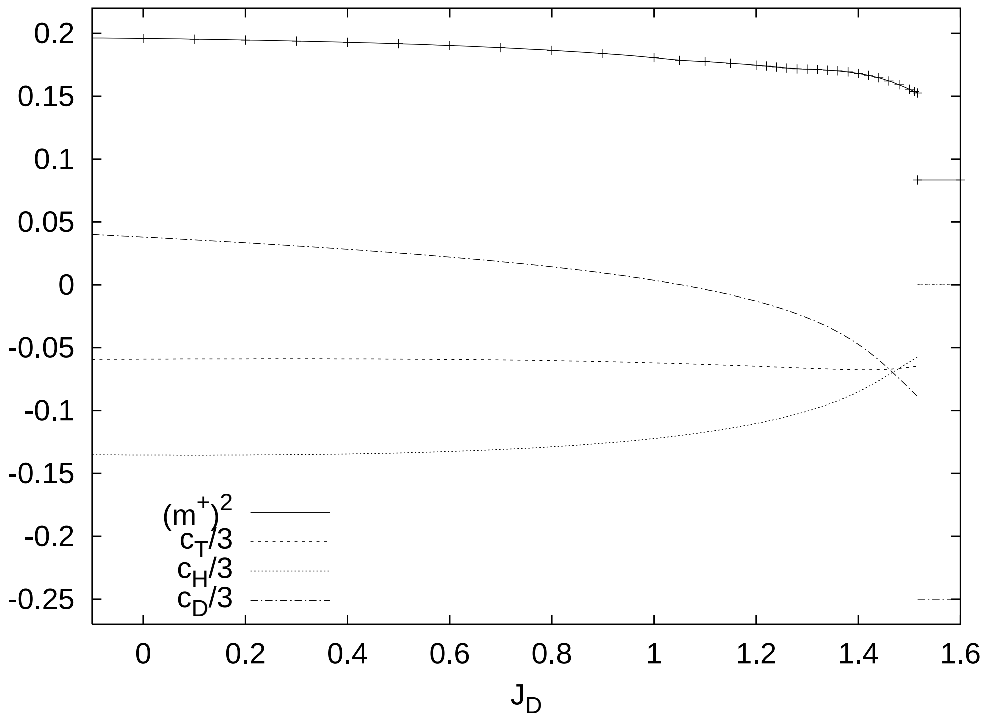


Abbildung 4.48: Darstellung der drei verschiedenen Nachbarkorrelationen $c_\alpha = \langle S_i S_j \rangle$ mit $\alpha = C, D, T$ (siehe Abbildung 4.29) und dem Quadrat der totalen Magnetisierung für den HAFM auf einer p6m-symmetrischen T4H-Gitterzelle mit $N = 18$ und J_D als Parameter. Zwischen dem T4H-Fall mit $J_D = 1$ und dem TSHS-Fall mit $J_D = 0$ gibt es keine wesentlichen Änderungen in den Korrelationen. Erst für etwa $J_D > 1.4$ treten Änderungen auf, die schließlich im Übergang zur Dimerphase mit $c_T = c_H = 0$, $c_D = -3/4$ enden.

liefert $m^+ = 0.106(62) + 1.4(3)L^{-1}$. Wegen des hohen Rechenaufwandes für die Berechnung der ersten Anregung des Systems mit $N = 36$ wurde hier auf die Extrapolation und Diskussion der magnetischen Anregungslücke verzichtet.

Abbildung 4.48 zeigt den Verlauf der Nachbarkorrelationen $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ für den quantenmechanischen Fall auf einer endlichen Gitterzelle mit $N = 18$ in Abhängigkeit des Parameters J_D. Die Abhängigkeiten der quantenmechanischen Korrelationen zeigen dabei ein zum klassischen Antiferromagneten konformes Verhalten. Die Korrelation c_T zwischen benachbarten Spins auf einem Dreieck verändert sich nur geringfügig von $c_T/3 = \langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.059100$ für $J_D = 0$ zu $c_T/3 = \langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.062100$ für $J_D = 1$. Die Korrelation c_H zwischen benachbarten Spins auf einem Sechseck wächst betragsmäßig um etwa 11% von $c_H/3 = \langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.122224$ für $J_D = 1$ zu $c_H/3 = \langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.135367$ für $J_D = 0$. Für das klassische Modell wuchs diese Korrelation um etwa 15%. Die Korrelation auf den Dimerbindungen c_D des T4H-Gitters ist nahezu verschwindend für $J_D = 1$ und wächst auf $c_D/3 = \langle S_i^z S_j^z \rangle = -0.037990$ für $J_D = 0$. Damit verhalten sich die Korrelationen sehr ähnlich zu denen des klassischen Modells.

Im Unterschied zum klassischen Modell tritt für genügend große J_D eine neue quantenmechanische Phase auf. Diese Phase ist ein Produktzustand aus Singuletts, der ähnlich dem Dimerzustand beim Shastry-Sutherland-Modell [119] ein exakter Eigenzustand des Heisenbergmodelles auf dem T4H-Gitter [101] mit beliebigem J_D ist.

4.4.8 Der HAFM auf dem TDD-Gitter

Das TDD-Gitter (3.12^2) ist ein Archimedisches Gitter mit kleiner Koordinationszahl $z = 3$, welches aus Dreiecken (T) und Zwölfecken (D) besteht. Das TDD-Gitter hat sechs Spins je geometrischer Einheitszelle und besitzt p6m-Symmetrie. Der AFM auf dem TDD-Gitter ist frustriert. Der klassische Grundzustand des AFM auf dem TDD-Gitter ist sehr hoch entartet und damit sehr ähnlich dem klassischen Grundzustand des Kagomé-Gitters. Auf den Dreiecken sind die klassischen Spins im Grundzustand um $2\pi/3$ gegeneinander gedreht. Benachbarte Spins zweier verschiedener Dreiecke sind um π gegeneinander gedreht. Wie beim Kagomé-Gitter (siehe Bild 4.23) gibt es auch auf dem TDD-Gitter q=0-Grundzustände und Grundzustände mit verdreifachter magnetischen Elementarzelle und $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Symmetrie (Bild 4.49).

Bei den q=0-Zuständen können ganze Ketten von Spins (z.B. β, $\bar{\beta}$, γ und $\bar{\gamma}$) um die Achse der angrenzenden Spins (z.B. α und $\bar{\alpha}$) rotieren, ohne daß sich die Energie des Zustandes ändert. Wie beim Kagomé-Gitter liefert jede parallele Kette einen zusätzlichen Freiheitsgrad, womit die Anzahl der Freiheitsgrade proportional zur Wurzel der Gittergröße $\sqrt{N}$ ist. Bei den $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zuständen können die Spins entlang eines Dodekagons (regelmäßiges Zwölfeck) um die Achse benachbarter Spins gedreht werden, ohne daß sich die Energie des Zustandes ändert. Da die Anzahl der Dodekagone proportional zur Gittergröße N ist, hat dieser Zustand mehr Freiheitsgrade als der q=0-Zustand.

Neben dieser Gemeinsamkeit mit dem Kagomé-Gitter gibt es jedoch auch wesentliche Unterschiede. So hat das TDD-Gitter weniger nächste Nachbarn ($z = 3$) als das Kagomé-Gitter ($z = 4$). Es besitzt eine doppelt so große Elementarzelle, so daß weniger endliche Gitterzellen für exakte Diagonalisierung und Extrapolation zum thermodynamischen Limes zur Verfügung stehen. Weiterhin besitzt das TDD-Gitter zwei verschiedene Typen von Bindungen, wogegen beim Kagomé-Gitter alle Bindungen vom gleichen Typ sind. Zur Unterscheidung bekommen Bindungen, die Dreiecke bilden, den Index T und Bindungen, die nur an Dodekagonen liegen, den Index D.

Obwohl der AFM auf diesem Gitter interessante und dem AFM auf dem Kagomé-Gitter sehr ähnliche Eigenschaften besitzt, war er bisher kaum Gegenstand von theoretischen Untersuchungen. Nur eine Arbeit zum Ising-Modell [144] beschäftigt sich mit den interessanten Eigenschaften dieses Gitters, das dort auch erweitertes Kagomé-Gitter genannt wird.

Für den quantenmechanischen Fall mit $s = 1/2$ sind die Energien in Abhängigkeit von der Quantenzahl S in Abbildung 4.50 für drei verschiedene Gitterzellengrößen dargestellt. Wie beim Kagomé-Gitter findet man den vom Isinganteil des Hamiltonoperators stammenden Knick bei $S = N/6$. Er ist jedoch deutlich geringer ausgeprägt. Eine weitere Auffälligkeit ist die deutliche Lücke zwischen Grundzustand und Anregungen zu bestimmten S bei kleiner Spinquantenzahl S. Beim Kagomé-Gitter ließ sich eine mit N stark wachsende Anzahl von Zuständen in der magnetischen Anregungslücke finden, die mit Quantenflüssigkeitseigenschaften in Verbindung gebracht wird. Für den HAFM auf dem TDD-Gitter finden sich keine solche Anregungen.

Um diese Eigenschaft des Spektrums genauer zu untersuchen, wurden in Abbildung 4.51 verschiedene Bindungsstärken J_D (Bindung zwischen Dodekagonen) und J_T (Bindung an Dreiecken) gewählt. Links oben sind die Dreiecksspins untereinander nur schwach gebunden ($J_T/J_D = 0.1$),

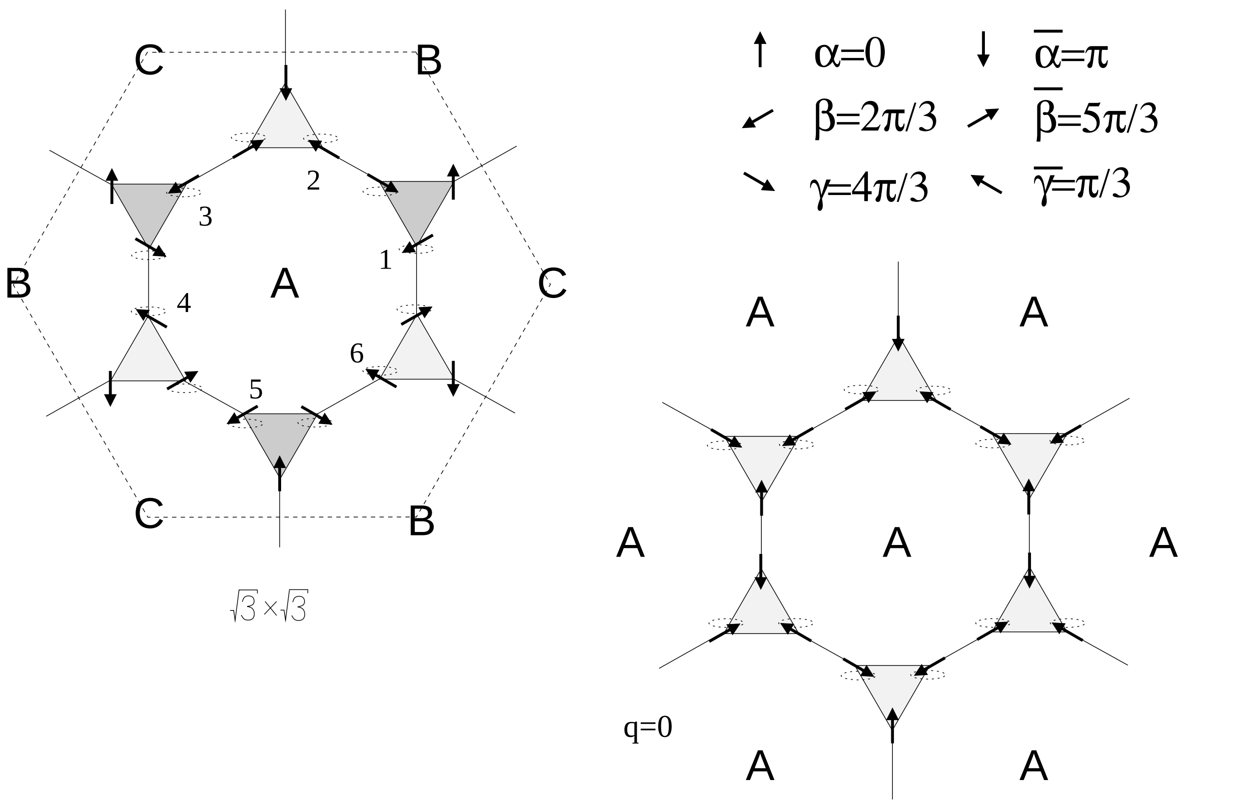


Abbildung 4.49: Mögliche Grundzustände des klassischen Antiferromagneten auf dem TDD-Gitter (3.12^2): links oben der $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand, rechts unten der q=0-Zustand. Die gepunkteten Ellipsen deuten weitere Freiheitsgrade des hoch entarteten klassischen Grundzustandes an. Das gestrichelte Sechseck markiert die magnetische Wigner-Seitz-Zelle des $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustandes und ist dreimal so groß, wie die geometrische Einheitszelle. Die aus sechs Spins (A1 bis A6) bestehende geometrische Wigner-Seitz-Zelle ist ein Sechseck, dessen Eckpunkte in den Zentren der Dreiecke liegen (nicht dargestellt). Die magnetische Elementarzelle des q=0-Zustandes fällt mit der geometrischen Wigner-Seitz-Zelle zusammen (ebenfalls nicht dargestellt). Die hell- und dunkelgraue Färbung der Dreiecke symbolisiert die Chiralität (Drehsinn) des Spintripels.

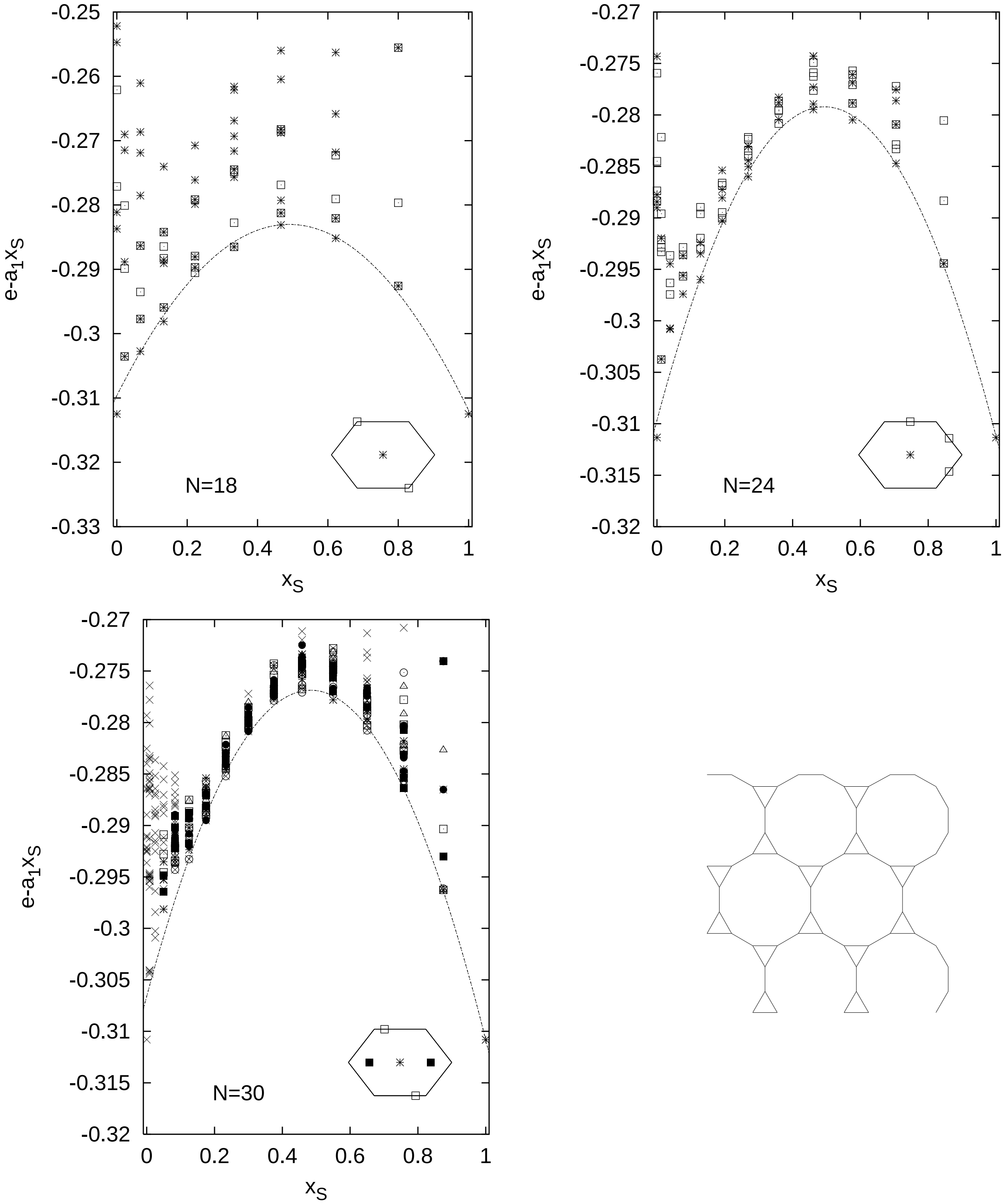


Abbildung 4.50: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen TDD-Gittern (3.12^2). Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2).

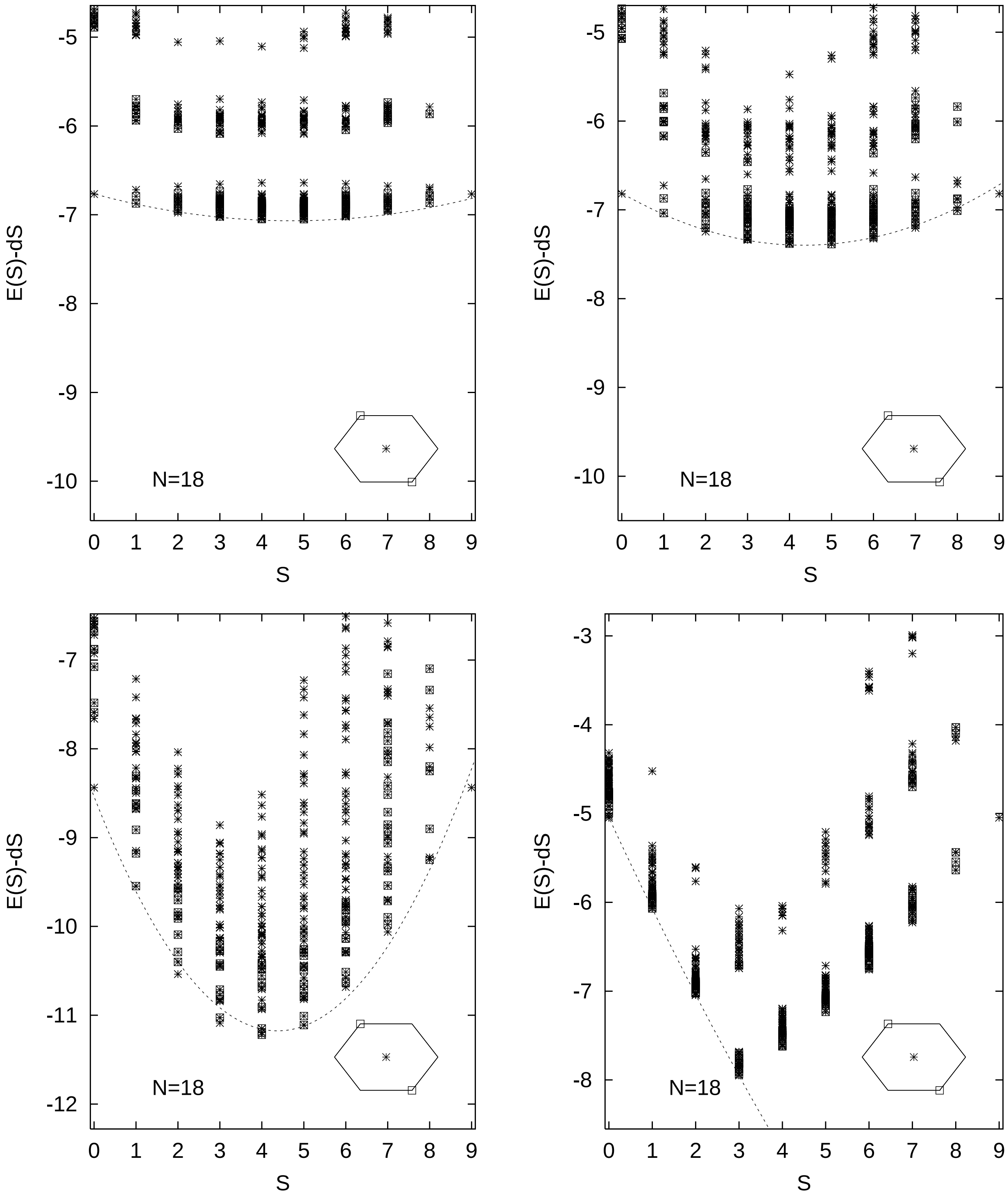


Abbildung 4.51: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden Quantenzahlen S für den HAFM auf endlichen TDD-Gittern mit verschiedenen Parametern J_T und J_D (siehe Text). Zur besseren Übersicht wurde der lineare Term dS subtrahiert, wobei $d = (E_{max} - E_{min})/(S_{max} - S_{min})$ ist, so daß die minimalen Energien zu verschiedenen S in etwa auf einer Horizentalen liegen. Parametersätze sind von links oben nach rechts unten ($J_D = 1$, $J_T = 0.1$), ($J_D = 1$, $J_T = 0.2$), ($J_D = 1$, $J_T = 1$) und ($J_D = 0.2$, $J_T = 1$).

die Spinpaare entlang der Bindung J_D dagegen stark. Das Spektrum muß demzufolge dem freier Spinpaare (Dimere) sehr ähneln. Man findet daher einen einzelnen tiefliegenden Zustand für $S = 0$ und erst etwa $2J_D$ (zwei Triplett-Singulett Anregungen) darüber die erste Anregung mit $S = 0$. Die Energie E steigt bei $J_T = 0$ linear mit der Spinquantenzahl S (freie Dimere) und bildet Bänder $E_m(S) = -3N/8 + S + m$. Kleine Kopplung J_T zwischen den Dimeren hebt die Entartung der Energien auf, und es bilden sich schmale Bänder mit zu J_T proportionaler Breite. Vergrößert man nun das Verhältnis der Bindungen J_T/J_D, so verbreitern sich diese Bänder (Bild 4.51, rechts oben) bis die Anregungslücke $E_1(S = 1) - E_0(S = 1)$ geschlossen wird. Rechts unten im Bild 4.51 findet man dann den Fall starker Dreieckskopplung ($J_T/J_D = 5$). Die drei Spins jedes Dreiecks bilden einen neuen effektiven Spin mit $s = 1/2$. Diese Spins koppeln über J_D. Durch Flippen dieser effektiven Spins kann man den Gesamtspin S des Systems schrittweise bis $S = N/6$ erhöhen. Um S weiter zu erhöhen, muß ein Dreieck einen neuen effektiven $s = 3/2$-Zustand bilden. Daraus erklärt sich der scharfe Knick im Energieverlauf in Abbildung 4.51 rechts unten. Folgt man diesem qualitativen Bild, so zeigt das Energiespektrum im Fall $J_D = J_T = 1$ deutliche Eigenschaften von Singulett-Spinpaaren (Dimere), die untereinander schwach gekoppelt sind, was sich im nichtlinearen Verlauf von $E(S)$ zeigt. Erweist sich dieses Bild auch für größere Systeme als korrekt, so sollte der HAFM auf dem TDD-Gitter wie das Kagomé-Gitter im thermodynamischen Grenzfall ungeordnet sein. Die Unordnung ist jedoch von einfacherer Natur und der Charakter des Grundzustandes entspricht dem freier antiferromagnisch gekoppelter Spinpaare.

Um diese Vorstellung noch zu untermauern, sollen in Bild 4.52 die Spinkorrelationen für variable Kopplung J_D dargestellt werden. Neben den nächsten Nachbarkorrelationen ist auch die Magnetisierung m^+, beziehungsweise dessen Quadrat $(m^+)^2$, aufgetragen.

Betrachtet man die Spinkorrelationen, so fällt sofort der Unterschied zwischen den Spin-Spin-Korrelationen bei benachbarten Plätzen auf. Die Spinkorrelation zwischen benachbarten Spins verschiedener Dreiecke $c_D = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ ist mehr als dreimal so groß wie die Korrelation benachbarter Spins im selben Dreieck c_T. Die Magnetisierung m^+ hat in der Nähe von $J_D = J_T$ ihr Maximum. Für kleine und ferromagnetische Dimerkopplung J_D findet man zwei Übergänge zu Grundzuständen mit anderer Symmetrie. Im Grenzfall sehr starker ferromagnetischer Kopplung J_D entspricht das System einem Spin-1-Kagomé-System.

Interessant wäre es, die Entwicklung der Korrelationen für verschiedene Kopplungen J_D mit wachsender Systemgröße N zu betrachten. Leider erfordert die Berechnung der Korrelationen für $N = 36$ noch einen zu hohen Zeitaufwand. Das hier dargestellte System $N = 18$ ist extrem durch die Randbedingungen beeinflußt. Beispielsweise unterscheidet der oben besprochene Entartungsgrad des klassischen Systems bei nur $N = 18$ Spins nicht zwischen $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand und q=0-Zustand. Damit haben sie das gleiche Boltzmann-Gewicht, was die Verhältnisse im dem thermodynamischen Limes nicht wiederspiegelt, wo der $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Zustand durch den höheren Entartungsgrad dominiert.

Bild 4.53 zeigt die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie und der ersten magnetischen und nichtmagnetischen Anregungen in Abhängigkeit von der Systemgröße. Gitterzellen mit besonders kurzem Randvektor ($l = 1$) weichen deutlich nach unten ab (gestrichelte Kurven). Die anderen Werte liegen annähernd auf Geraden. Das größte berechnete System mit $N = 36$ und $8N/6$ Punktsymmetrien hat eine Grundzustandsenergie von $E/N_{nn} = 2E/(3N) = -0.31034838$, und die Magnetisierung des Grundzustandes ist $m^+ = 0.082299$. Die Korrelation zwischen nächsten

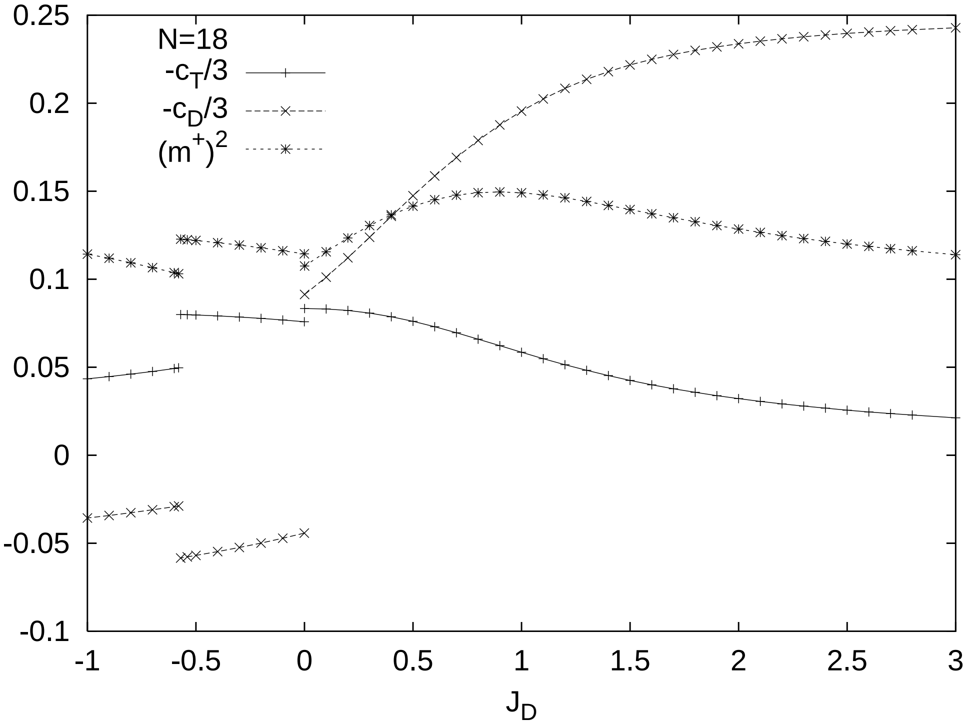


Abbildung 4.52: Darstellung der zwei verschiedenen Nachbarkorrelationen und des Quadrates der totalen Magnetisierung für den HAFM auf einer p6m-symmetrischen TDD-Gitterzelle mit $N = 18$ und J_D als Parameter.

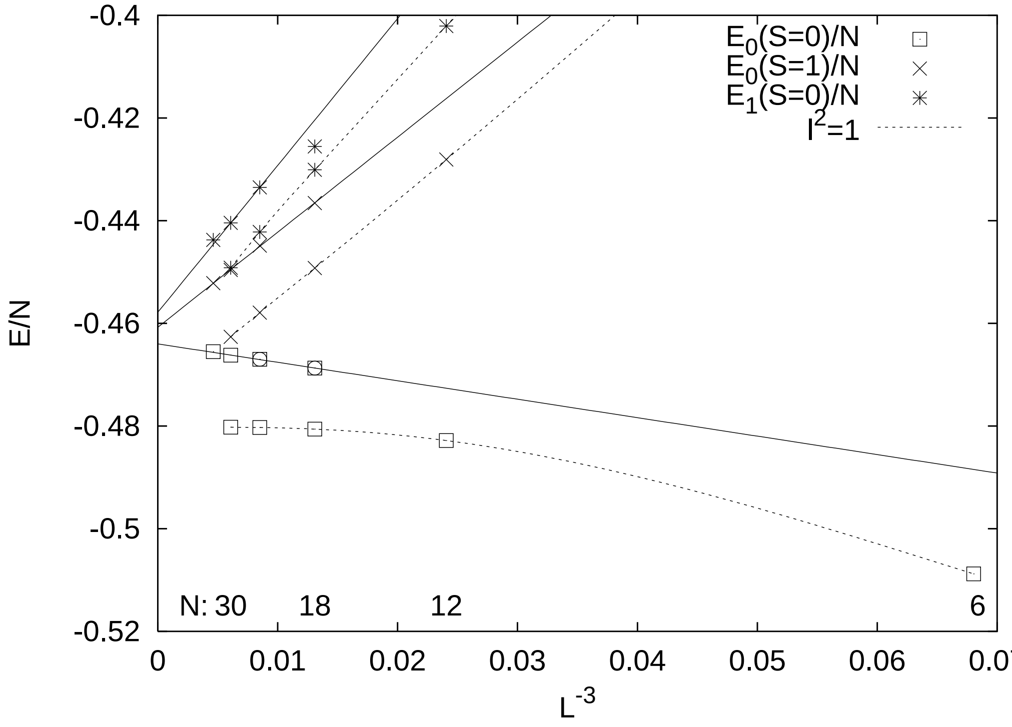


Abbildung 4.53: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(S=0)/N$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TDD-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Zusätzlich ist die Abhängigkeit der Energie auch für die kleinste magnetische ($E_0(S=1)$) und kleinste nichtmagnetische $E_1(S=0)$) Anregung dargestellt. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = 1$ besitzt.

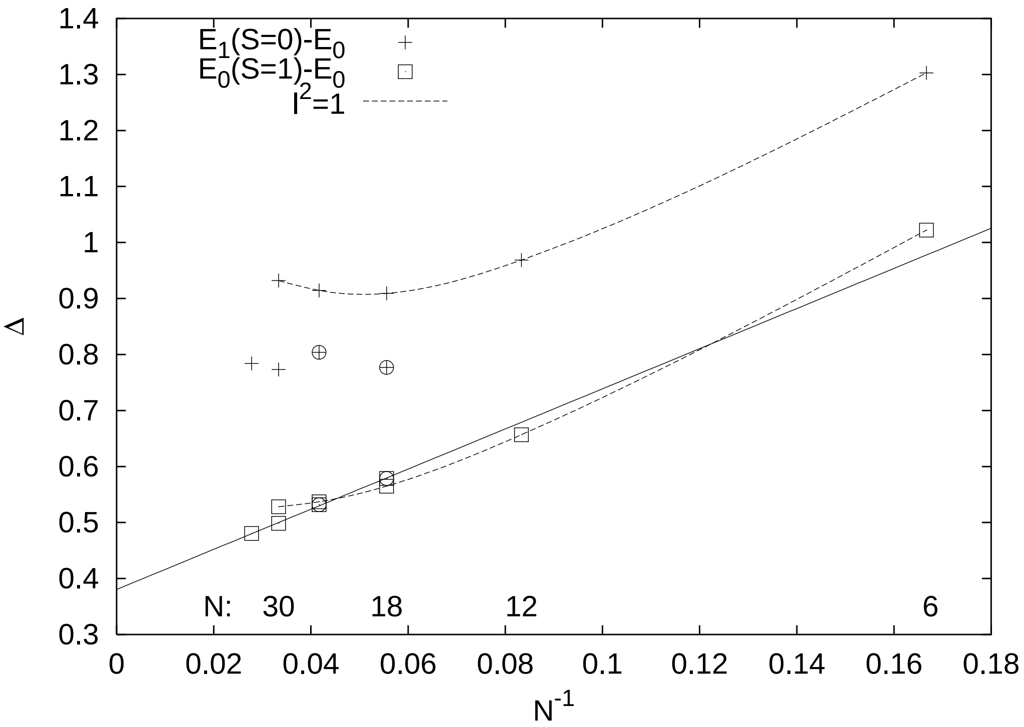


Abbildung 4.54: Magnetische ($\Delta = E_0(S=1)-E_0$) und nichtmagnetische ($\Delta = E_1(S=0)-E_0$) Energielücke (Gap) des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TDD-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = 1$ besitzt.

Nachbarn ist für das System mit $N = 36$ Spins im Mittel $c_T = -0.170339$ auf den Dreiecksbindungen und $c_D = -0.590367$ auf den Dimerbindungen. Die Extrapolationen sind mit erheblicher Unsicherheit behaftet, da die Gitterzellen — gemessen in Einheitszellen — sehr klein sind. Diese Unsicherheit zeigt sich auch in den starken Abweichungen zwischen der extrapolierten Grundzustandsenergie E_0/N und den Anregungsenergien E_1/N und beträgt etwa 11%. Das ist deutlich größer als der rein statistische Fehler von unter 0.1%.

Das nächste Bild, Abbildung 4.54, zeigt die Differenz zwischen erster magnetischer Anregungsenergie und Grundzustandsenergie $\Delta = E_0(S=1) - E_0(S=0)$. Nimmt man die Extrapolation ernst, so hat das System im thermodynamischen Limes eine endliche Anregungslücke von etwa $\Delta = 0.380(8)$. Das ist im Vergleich zu den anderen Tilings der größte Wert. Der recht große Wert würde auch das weiter oben gewonnene Bild vom Dimercharakter des Grundzustandes unterstützen. Auch die Extrapolation der nichtmagnetischen Singulett-Singulett-Lücke in Abbildung 4.54 mit etwa dem doppelten Wert $\Delta(S=0) \approx 0.8$ der magnetischen Lücke paßt sehr gut zu dem Gesamtbild.

Die Extrapolation der Magnetisierung m^+, dargestellt in Bild 4.55, liefert einen Wert von $m^+ = 0.038(4)$. Im Vergleich zu den anderen zweidimensionalen Gittern ist dieser Wert ausgesprochen klein und in der Größenordnung des Wertes vom Kagomé-Gitter (etwa das Doppelte). Bedenkt man dabei die „Kleinheit“ der zur Extrapolation verwendeten Systeme, die sich zum Beispiel in einer höheren Zahl von Punktsymmetrien äußert, so ist eine verschwindende Magnetisierung

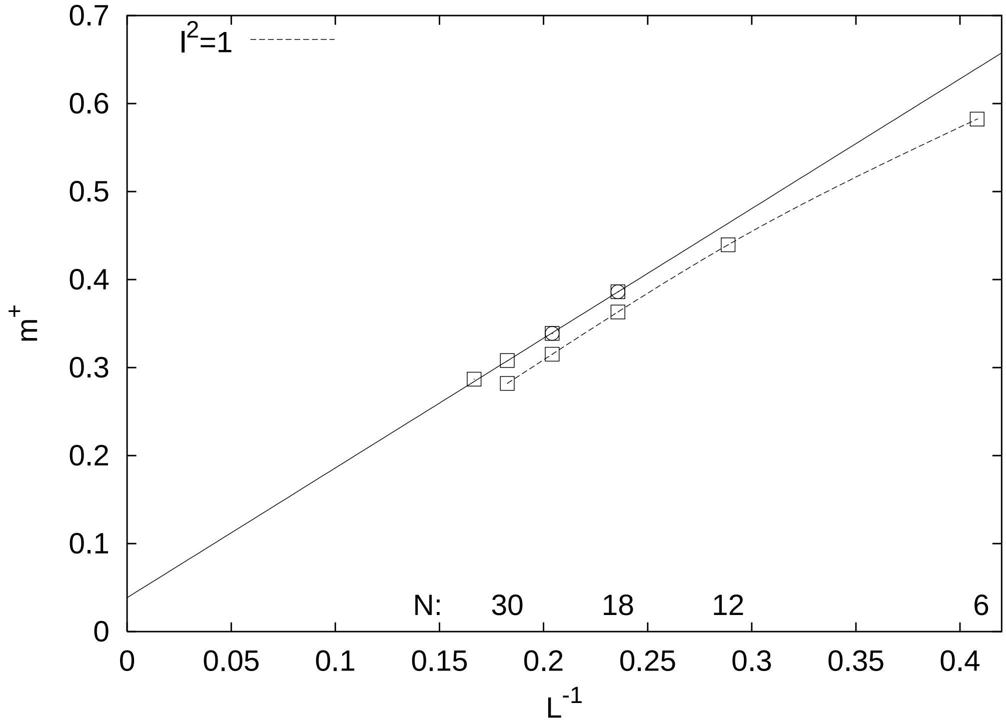


Abbildung 4.55: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem TDD-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die gestrichelten Kurven verbinden Werte, bei denen die kürzeste Seite der Gitterzelle eine Länge von $l = 1$ besitzt.

für den thermodynamischen Limes wahrscheinlich. Leider kann man auch vom nächst größeren System mit $N = 42$ keine bessere Extrapolation erwarten, da es ebenfalls mehr Punktymmetrien $(4 \cdot 12N/6)$ besitzt, als die p6m-Symmetrie erzeugt $(12N/6)$. Erst eine Gitterzelle mit mehr als 9 Einheitszellen könnte mehr Klarheit schaffen. Aber schon die Dimension des Hilbertraums für das System mit $N = 42$ Teilchen unter Nutzung von Spininversion und aller Punktsymmetrien ist trotz der 4 mal höheren Zahl an Symmetrien mit etwa $N!/((N/2)!)^2/(2 \cdot 4 \cdot 12N/6) = 801 \cdot 10^6$ so groß, daß es gerade mit den größten heute verfügbaren Computern berechenbar wäre. So müssen zukünftig weitere Näherungsmethoden verwendet werden, um die Natur des Grundzustandes für den HAFM auf dem TDD-Gitter zu klären.

4.4.9 Der HAFM auf dem SHD-Gitter

Das p6m-symmetrische SHD-Gitter (4.6.12) hat unter den archimedischen Gittern mit zwölf Plätzen die größte geometrischen Elementarzelle. Die Gitterstruktur enthält nur reguläre Polygone mit gerader Anzahl von Ecken (Quadrat, Hexagon und Dodekagon) und ist daher bipartit. Der Grundzustand des klassischen Antiferromagneten auf dem SHD-Gitter ist somit der Néel-Zustand. Mit drei nächsten Nachbarn ($z = 3$) sollte sich der Heisenbergantiferromagnet auf diesem Gitter ähnlich dem auf dem SOO-Gitter (4.8^2) verhalten. Im Unterschied zum SOO-Gitter ist die magnetische Elementarzelle jedoch mit der geometrischen identisch. Abbildung 4.56 zeigt die niedrigsten Energien E dreier endlicher Systeme in Abhängigkeit von der Quantenzahl $S(S + 1)$. Deutlich sichbar sind auch hier wieder die vom restlichen Energiespektrum separierten tiefstliegenden quasientarteten Zustände. Da die magnetische Elementarzelle des Grundzustandes für den klassischen AFM und die geometrische Elementarzelle übereinstimmen, gehören diese Zustände zu den Eigenzuständen mit dem Translationsvektor $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 = (0, 0)$. Weiterhin sind die niedrigsten Zustände der verschiedenen S-Sektoren symmetrisch gegen Drehung um $2\pi/3$ am Symmetriezentrum C_3 und abwechselnd symmetrisch oder antisymmetrisch gegen Spiegelung an einer Achse durch die Zentren von aneinanderliegenden Vier- und Zwölfecken. In Bild 4.56 findet man die Spektren für Gitterzellen mit einer (oben links), zwei (oben rechts) und drei (unten links) geometrischen Elementarzellen. Da die Brillouinzone für $N = 12$ nur einen Punkt enthält, sind hier Zustände mit unterschiedlicher C_6-Symmetrie (Sterne $C_6 = 0$, volle Quader $C_6 = 2\pi/3$ und leere Quader $C_6 = \pi/3$) verschieden dargestellt.

Das nächst größere System mit $N = 24$ Plätzen hat zwei Elementarzellen und deshalb zwei Punkte im reziproken Raum. Bild 4.56 rechts oben stellt das Energiespektrum für das System mit $N = 24$ Plätzen dar. Die Gitterzelle hat nicht die Symmetrie des SHD-Gitters.

Die größte mit exakter Diagonalisierung zu bewältigende Gitterzelle mit $N = 36$ enthält drei Elementarzellen und ist damit recht klein. Sie hat die volle p6m-Symmetrie des SHD-Gitters. Die Energie pro Bindung ist $E/N_{nn} = -0.3731177$. Die Energie verteilt sich ungleichmäßig auf die drei verschiedenen Bindungen. Maximal gekoppelt sind Spins entlang der gemeinsamen Kante zwischen Quadrat (S) und Hexagon (H). Sie beträgt $\langle S_i^z S_j^z \rangle_{SH} = -0.138108$. Die anderen Korrelationen zwischen nächsten Nachbarn (nn-Korrelationen) sind $\langle S_i^z S_j^z \rangle_{SD} = -0.131682$ und $\langle S_i^z S_j^z \rangle_{HD} = -0.103328$. Damit weichen die Korrelationen am Quadrat um nur 5% voneinander ab. Die verbleibende Korrelation auf der Kante zwischen Hexagon un Dodekagon ist dagegen etwa 30% kleiner. Damit sind die Verhältnisse der nn-Korrelationen sehr ähnlich zu denen beim SOO-Gitter. Das Quadrat der Magnetisierung beträgt für den Grundzustand des $N = 36$-Systems $(m^+)^2 = 0.163243$.

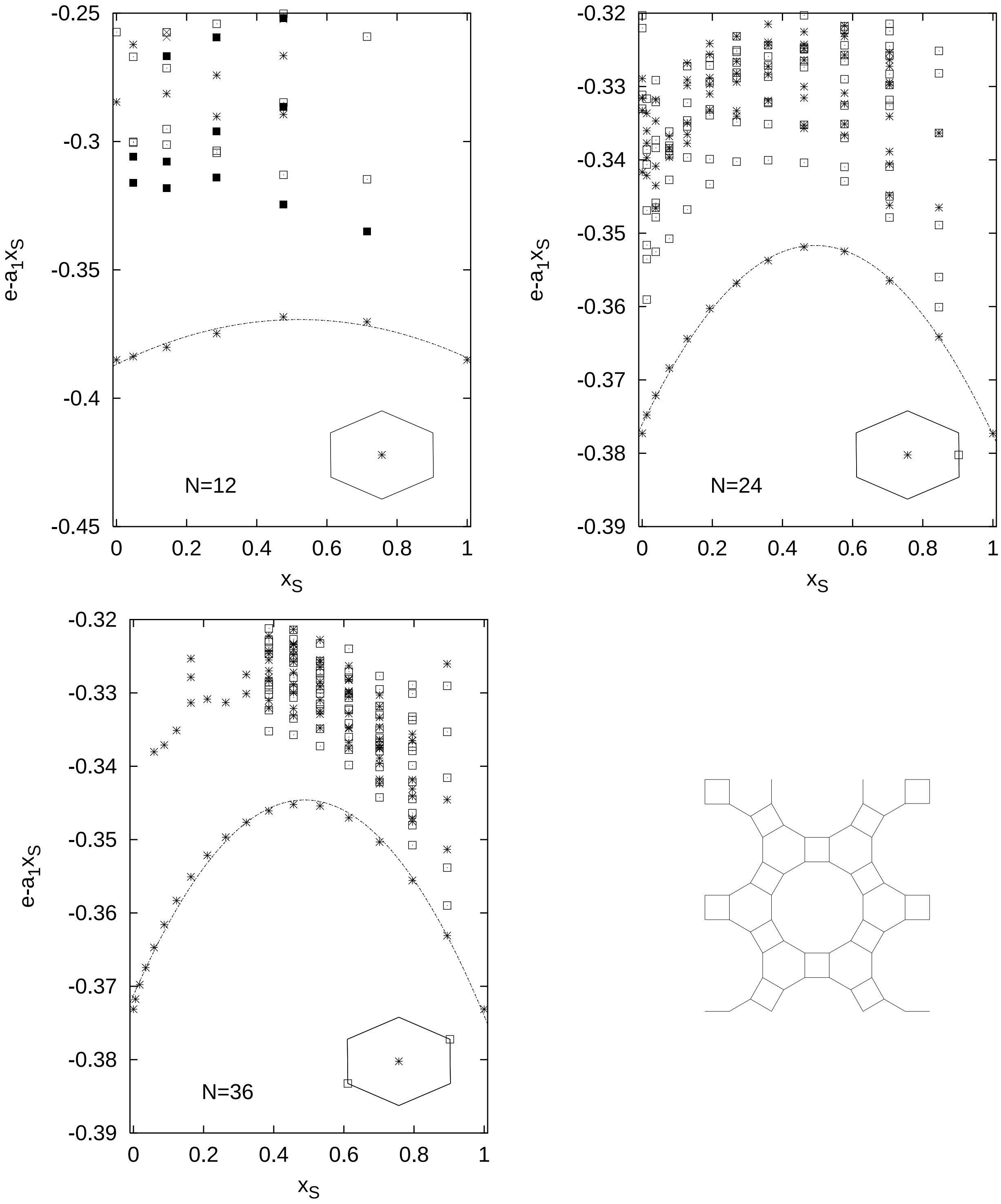


Abbildung 4.56: Energie E der Eigenzustände zu entsprechenden normierten Quantenzahlen $x_S = X_S/X_{S,max}$ ($X_S = S(S+1)$) für den HAFM auf endlichen SHD-Gittern (4.6.12). Zur besseren Übersicht wurde $a_1 X_S$ subtrahiert (siehe Anhang C.2). Für $N = 36$ wurde wegen des hohen Berechnungsaufwandes auf die Darstellung der Anregungen für kleine S verzichtet.

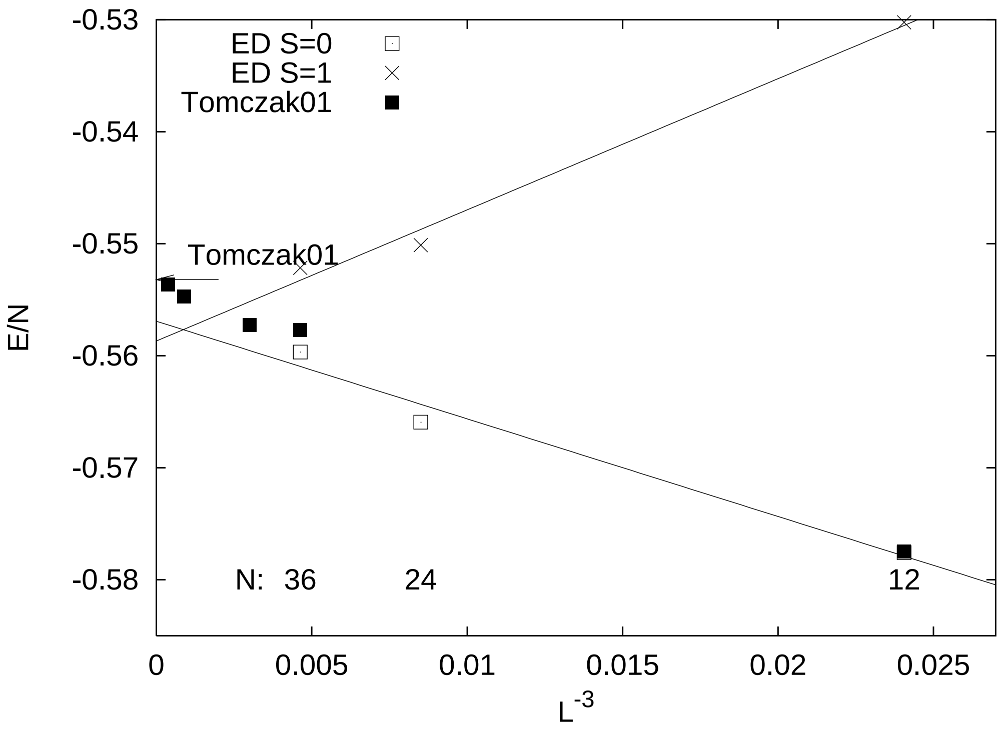


Abbildung 4.57: Energie pro Platz des Grundzustandes $E_0(S=0)/N$ des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem SHD-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N=L^2$. Zusätzlich ist die Abhängigkeit der Energie auch für die kleinste magnetische Anregung $(E_0(S=1))$ dargestellt. Die Geraden sind lineare Extrapolationen der exakten Daten. Zum Vergleich sind Ergebnisse einer variationellen Methode (Tomczak01 [143]) hinzugefügt.

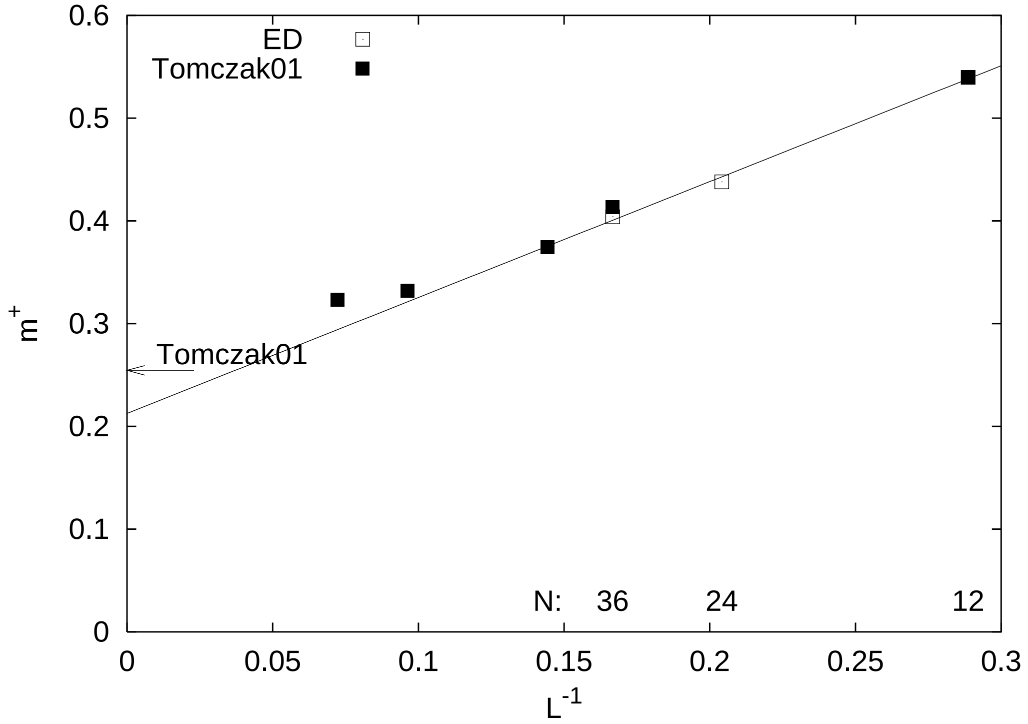


Abbildung 4.58: Magnetisierung des Grundzustandes des HAFM für endliche Gitterzellen auf dem SHD-Gitter in Abhängigkeit von der Systemgröße L mit $N = L^2$. Die durchgezogene Linie ist eine lineare Extrapolation der exakten Daten. Zum Vergleich sind Ergebnisse einer variationellen Methode (Tomczak01 [143]) hinzugefügt.

Die Extrapolation der Energien der endlichen Gitter mit einer, zwei und drei Elementarzellen ($N = 12$, 24, 36, Abbildung 4.57) kann wegen der sehr kleinen Systeme nur eine ungefähre Abschätzung darstellen. Lineare Extrapolation liefert eine Energie von $E/N = -0.557(2)$. Eine variationelle Methode liefert $E/N = -0.541$ [142] und spätere genauere Rechnungen $E/N = -0.5532$ [143]. Trotz der kleinen Systeme ist die Übereinstimmung des aus exakten Daten extrapolierten Wertes mit dem variationellen Wert sehr gut. Zum Vergleich wurde auch die Energie der kleinsten magnetischen Anregung extrapoliert. Die Abweichung beider Extrapolationen voneinander liegt im Prozentbereich. Der extrapolierte Wert für die Magnetisierung (Abbildung 4.58) des unendlich ausgedehnten Gitters beträgt $m^+ = 0.213(16)$. Er liegt nur geringfügig unter dem Wert für das topologisch ähnliche SOO-Gitter, was auf eine realistische Abschätzung hindeutet. Die variationelle Methode [143] sollte tendenziell die Magnetisierung etwas überschätzen. Für die endlichen Gitter ist die Magnetisierung auch über dem exakten Wert. Der durch Extrapolation von m^2 gewonnene Wert liegt bei $m = 0.2546$ und liegt damit fast 20% über dem aus den exakten Daten extrapolierten Wert.

4.5 Vergleich der archimedischen Tilings

Nachdem die einzelnen archimedischen Gitter in den vorhergehenden Abschnitten untersucht worden sind, sollen die Resultate in diesem Abschnitt direkt miteinander verglichen werden. Das Schema 4.2 aus dem einleitenden Kapitel 4.2 dient dabei als Ausgangspunkt.

4.5.1 Ordnung oder Unordnung?

Eine der wichtigsten Fragen, die in den vorhergehenden Abschnitten geklärt werden sollte, ist die Frage, ob der Grundzustand für den HAFM mit $s = 1/2$ auf den 11 archimedischen Tilings ferngeordnet ist oder nicht. Am deutlichsten zeichnen sich dabei die vier unfrustrierten Gitter ab. Die Energiespektren dieser Gitter zeigen die gleichen qualitativen Merkmale, von denen die Separation der tiefliegenden quasientarteten Zustände zu den auffälligsten gehört. Auch die Magnetisierung dieser Gitter liegt mit 40 bis 63% des klassischen Wertes ($m^+ = s = 1/2$) deutlich über den Werten der anderen Gitter.

In Tabelle 4.5 ist die totale Magnetisierung $m^+ = M^+/N$ nach Gleichung A.11 der verschiedenen archimedischen Gitter für das antiferromagnetisch Heisenbergmodell ($s = 1/2$) und für den klassischen Antiferromagneten ($s \to \infty$, O(3)-Modell) aufgeführt. Die Magnetisierung der klassischen Gitter wurde dabei auf s normiert und ist damit bei den bipartiten Gittern mit kolinearem Grundzustand mit $m^+/s = 1$ maximal. Tabelle 4.6 zeigt die Ergebnisse aus Extrapolationen der magnetischen Anregungslücke für die verschiedenen Gitter. Die Abhängigkeit der Qualität der Extrapolationen von der Größe der Einheitszelle und damit der maximal erreichbaren Gittergrößen macht sich in der Anregungslücke viel stärker bemerkbar als in den extrapolierten Magnetisierungen. Daher sind die Extrapolationen für Gitter mit großen Elementarzellen mit entsprechenden Fragezeichen versehen.

Der Grundzustand des HAFM auf den vier bipartiten und damit unfrustrierten Gittern der archimedischen Tilings zeigt deutliche Eigenschaften von magnetischer Ordnung. Bei den beiden

Tabelle 4.5: Vergleich der totalen Magnetisierung m^+ (Gleichung A.11) der verschiedenen archimedischen Gitter für den quantenmechanischen Heisenberg-Antiferromagneten mit $s = 1/2$ und für den klassischen Antiferromagneten ($s \to \infty$, O(3)-Modell). Die Magnetisierung für das Heisenbergmodell mit $s = 1/2$ wurde aus Extrapolationen endlicher Gitterzellen gewonnen. Mit Fragezeichen versehene Werte beruhen auf wenigen Datenpunkten und besitzen daher zusätzliche Unsicherheit. Mit Stern gekennzeichnet Systeme haben einen hochentarteten klassischen Grundzustand. m^2 ist die Summe der quadrierten Paarkorrelationen (Formel A.9) des Grundzustandes im klassischen Limes.

Tiling	$s = 1/2$ m^+	$O(3)$ $(m^+)^2/s^2$	O(3) m^2/s^2
Quadrat	0.3173(11)	1	1
Honigwaben	0.286(3)	1	1
SOO	0.230(8) ?	1	1
SHD	0.213(16)	1	1
TTSTS	0.229 ?	1	1
Dreieck	0.158(7)	0.666667	0.5
TSHS	0.106 ?	0.666667	0.5
Trellis	0.117 ?	0.636620	0.5
T4H	0.09 ?	0.622008	0.5
Kagomé	0.02(2)	0.5^*	0.33333^*
TDD	0.039(4) ?	0.5^*	0.33333^*

Tabelle 4.6: Vergleich der extrapolierten magnetischen Anregungslücke $\Delta_1(L) = D_0 + D_2 L^{-2} + D_3 L^{-3}$ mit $L^2 = N$ der verschiedenen archimedischen Gitter für den quantenmechanischen Heisenberg-Antiferromagneten mit $s = 1/2$. Für den Vergleich und bei ungenügender Zahl von Datenpunkten wurden lineare Extrapolationen durchgeführt. Die in den Klammern angegebenen Ziffern sind statistische Fehler. Mit Fragezeichen versehene Werte beruhen auf wenigen Datenpunkten, besitzen deshalb eine hohe Unsicherheit (z.B. TSHS mit nur $N = 18, 24$) und sollten eher als Obergrenzen betrachtet werden.

Tiling	D_0	D_2	D_3
Quadrat $N > 17$	0.015(10)	11.9(8)	-13(3)
Quadrat $N > 17$	0.063(4)	8.06(10)	—
Honigwaben $N > 17$	0.014(11)	9.3(9)	-10(3)
Honigwaben $N > 17$	0.054(5)	6.13(11)	—
SOO	0.102(1) ?	5.75(1) ?	—
SHD	-0.055 ?	17.58 ?	-35 ?
SHD $N > 12$	0.054 ?	7.82 ?	—
TTSTS	0.093 ?	7.83 ?	—
Dreieck $N > 12$	0.129(2)?	7.75(5) ?	—
TSHS	0.5 ???	1.8 ?	—
Trellis	0.46 ???	4.5 ?	—
T4H	0.3 ???	4.6 ?	—
Kagomé	0.24 ???	—	—
TDD	0.38 ???	3.6(1) ?	—

Gittern (SOO, SHD) mit topologisch verschiedenen nächsten Nachbarn sind die Spinpaarkorrelationen zwischen topologisch verschiedenen Nachbarn verschieden (Abweichung bis etwa 35%). Wählt man in diesen Systemen die entsprechenden Kopplungsstärken ebenfalls verschieden, kann man die Abweichungen noch verstärken oder letztendlich einen Übergang zu entkoppelten Dimeren, Dreiecks- oder Quadratkonfigurationen bewirken. Bei gleichen Kopplungsstärken zeigt sich der Néel-artige geordnete Zustand jedoch als robust. Somit zeigen alle HAFM auf zweidimensionalen archimedischen Gittern ohne frustrierende Bindungen einen Néel-artig geordneten Grundzustand.

Für die frustrierten Systeme ist eine Einteilung nach magnetisch geordnetem und ungeordnetem Grundzustand schwieriger. Allen Systemen gemein ist ein Knick im Verlauf der Grundzustandsenergie über Gesamtspin S, der besonders beim Kagomé-Gitter (bei $S = Ns/3$) ausgeprägt ist. Er läßt sich leicht durch den Ising-Anteil des Heisenbergoperators erklären. Beim TTSTS-Gitter (bei $S = Ns/2$) ist der Knick nur sehr gering ausgeprägt. Das Spektrum des HAFM auf dem TTSTS-Gitter weist trotz der gegenüber dem Quadratgitter zusätzlichen frustrierenden Diagonalbindungen (Bild 4.36) nur geringe Unterschiede zum Quadratgitter auf. Auch die Spinkorrelationen ändern sich durch die zusätzlich frustrierende Bindung kaum. Beides deutet auf eine gewisse Robustheit des Néel-geordneten Zustandes gegenüber Frustration. Ein ähnliches Verhältnis haben auch das T4H-Gitter und das TSHS-Gitter, die sich ebenfalls durch eine diagonal im Quadrat liegende frustrierende Bindung unterscheiden. Wieder sind Spektrum und Korrelationen beider Gitter sehr ähnlich und auch hier zeigt sich eine Robustheit des Grundzustandes gegenüber Frustration.

Mit Ausnahme des Kagomé- und des TDD-Gitters ähneln sich die Spektren in wesentlichen Punkten. So lassen sich die Symmetrien der tiefliegenden Zustände durch einen magnetisch geordneten Grundzustand erklären, dessen Ordnung der des Grundzustandes auf dem klassischen Antiferromagneten entspricht. Andere Eigenschaften deuten auch auf einen geordneten Grundzustand hin. So sind die niedrigsten Energien separiert von den Anregungen und man findet keine nichtmagnetischen Singulettanregungen unterhalb der ersten magnetischen Anregung. Auch die Magnetisierung, soweit sie extrapoliert werden konnte, ist deutlich von Null verschieden.

Die beiden verbleibenden Gitter sind das Kagomé- und das TDD-Gitter. Sie unterscheiden sich schon durch den klassisch hoch entarteten Grundzustand des Antiferromagneten von den anderen frustrierten Gittern. Beide Gitter scheinen sich deshalb auf den ersten Blick stark zu ähneln, dennoch lassen die gewonnenen Daten für den quantenmechanischen HAFM aber auf verschiedene Typen von Grundzuständen schließen. Vermutlich resultiert dieser Unterschied aus der Tatsache, daß die Bindungen zwischen nächsten Nachbarn beim Kagomé-Gitter topologisch gleich, jedoch beim TDD-Gitter topologisch verschieden sind.

Das Kagomé-Gitter ist bereits intensiv von anderen Autoren untersucht worden. Man findet unterhalb der ersten magnetischen Anregung eine mit der Systemgröße exponentiell wachsende Menge von nichtmagnetischen Anregungen. Diese Eigenschaft ist innerhalb der Klasse archimedischer Tilings einzigartig. Die Magnetisierung ist, soweit es die Genauigkeit der Extrapolation zuläßt, Null oder zumindest deutlich unterhalb der kleinsten Magnetisierung der bereits besprochenen Gitter. Man geht heute davon aus, daß der Grundzustand des $s = 1/2$-Heisenbergantiferromagneten magnetisch ungeordnet ist. Die in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse unterstützen dieses Bild.

Das TDD-Gitter ist bisher kaum Gegenstand von Arbeiten anderer Autoren gewesen. Wie beim

Kagomé-Gitter ist der Grundzustand des klassischen Antiferromagneten hoch entartet. Die extrapolierte Magnetisierung für $s = 1/2$ liegt wie beim HAFM auf dem Kagomé-Gitter nahe Null oder zumindest weit unterhalb der der anderen Gitter. Man findet bei der Extrapolation eine deutlich ausgeprägte magnetische Anregungslücke. Beim Kagomé-Gitter vermutet man zwar auch eine magnetische Anregungslücke, zumindest die Extrapolation endlicher Systeme zeigt aber kein so einheitliches Bild. Das Energiespektrum unterscheidet sich jedoch im quantenmechanischen Fall von dem des Kagomé-Gitters in wesentlichen Punkten. Es fehlen die nichtmagnetischen Anregungen unterhalb der ersten magnetischen Anregung. Die nichtmagnetischen Anregungen sind wie die magnetischen Anregungen vom Grundzustand durch eine Lücke getrennt. Faßt man diese Ergebnisse zusammen, so läßt sich für das TDD-Gitter im quantenmechanischen Fall zwar auch ein ungeordneter Grundzustand vermuten, jedoch ist seine Natur von der des Kagomé-Gitters verschieden. Er entspricht eher dem Bild lokaler Singulettformierung.

Zum Abschluß sollen die hier gewonnenen Schlußfolgerungen noch einmal in einer übersichtlichen Grafik dargestellt werden. In Bild 4.59 werden die archimedischen Gitter in einen von Koordinationszahl N_{nn} und Frustration aufgespannten Parameterraum dargestellt. Vermutlich geordnete und ungeordnete Gitter finden sich in Bereichen, die sich durch eine Kurve teilen lassen. Die Grenze beginnt unten links auf dem Punkt mit $nn = 2$ und $E/N_{nn} = -1$ (nicht dargestellt), wo die lineare Kette (kritisch) eingetragen werden müßte. Der weitere Verlauf der Kurve ist empirisch festgelegt. Die Übersicht 4.59 könnte durch weitere Gitter, zum Beispiel dreidimensionale Gitter erweitert werden. Dann sollte der HAFM auf dem Pyrochlor-Gitter [145, 146], ein dreidimensionales Pendant des zweidimensionalen Kagomé-Gitters mit einer Koordinationszahl von $nn = 6$ und einer klassischen Grundzustandsenergie von $E/N_{nn} = -1/3$, oberhalb oder zumindest nahe der vermuteten Trennlinie liegen.

Die Annahme von [97] wird untermauert, daß das Heisenbergmodell für $s = 1/2$ auf zweidimensionalen bipartiten Gittern mit gleichstarken Kopplungen und mit Koordinationszahlen größer gleich drei ($z \geq 3$) Néel-geordnet ist. Die hier gewonnenen Daten lassen sogar vermuten, daß auch die frustrierten Gitter magnetisch geordnet sind, solange die klassischen Pendants ebenfalls einfache Ordnung zeigen. Die einzigen Kandidaten für einen ungeordneten Grundzustand sind das Kagomé-Gitter und das TDD-Gitter. Beide Gitter haben einen klassisch hochentarteten Grundzustand und können deshalb zu den stark frustrierten Systemen gezählt werden.

4.6 Zusammenfassung

In dem vorliegenden Kapitel konnten natürlich nicht alle Aspekte der quantenmechanischen Eigenschaften des Heisenbergmodelles auf einer ganzen Klasse von zweidimensionalen Gittern betrachtet werden. Dennoch liefert diese Arbeit in Kapitel 4 eine erste Übersicht und eine große Menge an Daten für weitere Untersuchungen. Ein Teil dieser Gitter (Quadratgitter, Dreiecksgitter, Honigwabengitter, Kagomé-Gitter, Shastry-Sutherland und CaVO) ist in der Literatur bereits intensiv untersucht worden. Ein weiterer Teil (SHD, TSHS, T4H und Trellis) wurde in dieser Arbeit und in damit verbundenen Veröffentlichungen tiefgehender untersucht und war bisher nicht oder nur wenig Gegenstand von Veröffentlichungen. Bei dem verbleibenden Gitter (TDD) findet sich erst durch die hier gewonnene Übersicht Anreize zu weitergehenden Untersuchungen. In dieser Zusammenfassung will ich versuchen, die wesentlichen Resultate des Kapitels darzulegen und auf besondere Eigenschaften hinzuweisen, die weitere Arbeiten anregen können.

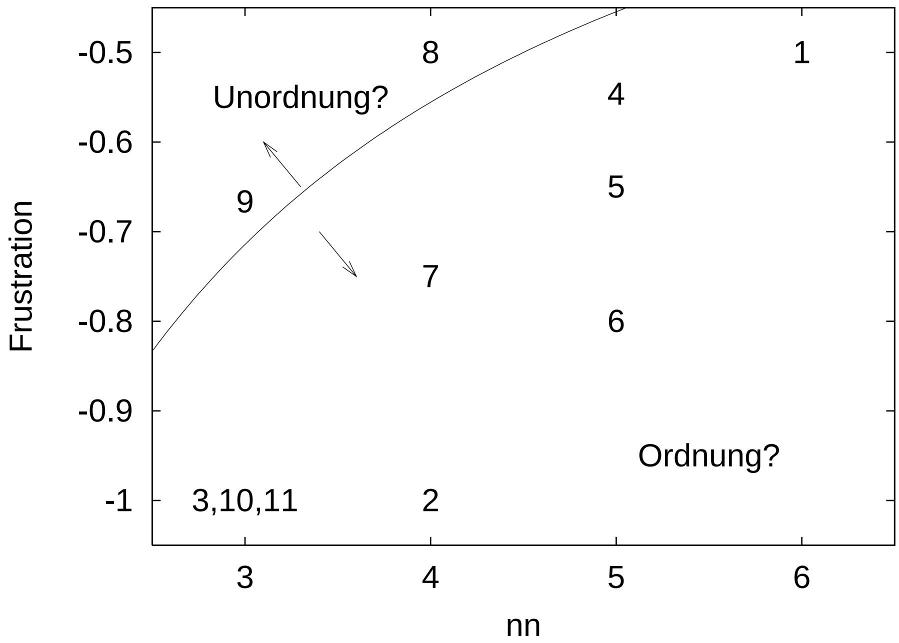


Abbildung 4.59: Durch die archimedischen Tilings aufgespannter Parameterraum aus Frustration und Koordinationszahl *nn* (Zahl der nächsten Nachbarn). Die Frustration wird hier definiert durch die Energie des klassischen Grundzustandes. Eine auf numerische Daten basierende fiktive Grenze teilt die Gitter in zwei Bereiche mit geordnetem und ungeordnetem Grundzustand.

Nach dem Vergleich der in den vorhergehenden Abschnitten aufgeführten Ergebnisse zu den einzelnen Gittern ergibt sich damit folgendes Bild: Der HAFM auf bipartiten und damit unfrustrierten Gittern zeigt alle Eigenschaften eines Néel-artig geordneten Grundzustandes. Nur für die komplexeren bipartiten Gitter läßt die Extrapolation der endlichen Gitterzellen nicht sicher auf eine verschwindende magnetische Anregungslücke schließen, da diese Gitter große Einheitszellen haben, was die Extrapolation deutlich erschwert. Auch die Magnetisierung scheint bei den komplexeren Gittern überschätzt zu werden.

Bei den frustrierten Gittern findet man nur zwei Gitter, das Kagomé- und das TDD-Gitter, bei denen deutliche Argumente für einen ungeordneten Grundzustand zu finden sind. Beide Gitter sind stark frustriert und haben einen hoch entarteten Grundzustand im Fall klassischer Spins. Die extrapolierte Magnetisierung ist etwa Null. Der kleine endliche Wert läßt sich durch die oben erwähnte Überschätzung bei komplexer gebauten Gittern erklären. Der HAFM auf dem TDD-Gitter wird in dieser Arbeit erstmalig betrachtet. Der extrapolierte Grundzustand ist zwar wie beim Kagomé-Gitter magnetisch ungeordnet, zeigt jedoch eine andere Natur. So finden sich beim HAFM auf dem TDD-Gitter deutliche Anzeichen nicht nur für eine magnetische Anregungslücke, sondern auch für eine größere nichtmagnetische Anregungslücke, wohingegen beim Kagomé-Gitter eine mit der Systemgröße exponentiell wachsende Zahl nichtmagnetischer Anregungen in der magnetischen Anregungslücke gefunden wird. Dieser Unterschied zwischen den beiden Gittern geht vermutlich darauf zurück, daß das TDD-Gitter zwei topologisch verschiedene Bindungen besitzt, wohingegen das Kagomé-Gitter nur aus topologisch identischen Bindungen gebildet wird.

Bei den anderen frustrierten Gittern scheint die Frustration zusammen mit den Quantenfluktuationen nicht stark genug zu sein, um die magnetische Ordnung zu zerstören. Somit lassen sich die in dieser Arbeit berechneten Daten zu einem sehr einfachen Bild zusammenfassen: Der HAFM auf den archimedischen Tilings besitzt nur dort einen ungeordneten Grundzustand, wo im klassischen Grenzfall ein hochentarteter Grundzustand zu finden ist. Zukünftige Rechnungen werden zeigen, ob dieses einfache Bild korrekt ist. Solche Rechnungen könnten größere endliche Systeme einschließen, aber auch größere Spinlängen $s > 1/2$ berücksichtigen, um ein besseres physikalisches Bild zu gewinnen.

Von den hier betrachteten Gittermodellen finden in reiner Form bisher nur einige ihre Realisierung in realen Materialien. Häufiger wurden diese Gitter in abgewandelter Form (Variation der Kopplungsparameter, Anisotropie oder zusätzliche inter- oder intraplanare Bindungen) zur Beschreibung experimentell zugänglicher Materialien benutzt. Insbesondere die exotischen Eigenschaften der Modelle oder Materialien stehen dabei oft motivierend im Vordergrund. Finden sich in den Modellen interessante Eigenschaften, so steigt oft auch bei den Experimentatoren die Motivation, komplexere Systeme zu synthetisieren, die sich durch diese Modelle beschreiben lassen und die ebenso interessante Eigenschaften zeigen können. In diesem Sinne erscheint das TDD-Gitter besonders interessant, da es wie das Kagomé-Gitter einen vermutlich ungerodneten quantenmechanischen Grundzustand hat.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der vorgelegten Arbeit sollte es sein, den Charakter des Grundzustandes des quantenmechanischen Heisenberg-Antiferromagneten (HAFM) auf den elf zweidimensionalen Gittern zu diskutieren, die zu der Klasse der archimedischen Gitter gehören. Um dieses Ziel zu erreichen, wurde eine universelle, für alle Gitter anwendbare Methode benutzt — die exakte Diagonalisierung endlicher Gitter verschiedener Größe mit anschließender Extrapolation zum thermodynamischen Limes. Zusätzlich sind in dieser Arbeit zwei weitere Kapitel zu finden. Diese sollen die Leistungsfähigkeit und Grenzen der hier hauptsächlich verwendeten Methode der exakten Diagonalisierung zeigen. Jedes Kapitel (2, 3 und 4) für sich enthält am Ende eine Zusammenfassung der wichtigsten Resultate. Hier soll nur das Wesentliche dieser Kapitel dargestellt werden.

Das Kapitel 2 beschäftigt sich mit dem HAFM auf einem dreidimensionalen BCC-Gitter (kubisch raumzentriert). Da die mit exakter Diagonalisierung zugänglichen Gittergrößen klein sind, ist die Ausdehnung der Gitterzellen, die zur Extrapolation verwendet werden, relativ klein. Dementsprechend sorgfältig muß die Extrapolation durchgeführt werden. Der Idee von Betts [74] folgend, werden hier auch schiefe Gitterzellen für die Extrapolation benutzt. Die Nutzung nur symmetrischer Zellen würde die Anzahl der Datenpunkte derart einschränken, daß sinnvolle Extrapolationen unmöglich wären. Trotz der kleinen Ausdehnung der Zellen weisen die extrapolierten Eigenschaften akzeptable Genauigkeiten auf, was durch den Vergleich mit den Ergebnissen anderer Arbeiten belegt wird. Die dabei gewonnenen Erfahrungen sind sehr nützlich für die Extrapolation der Daten für die zweidimensionalen archimedischen Gitter, da für diese wegen der zum Teil sehr großen Einheitszellen auch nur wenige Einheitszellen in den endlichen Gitterzellen sind.

Die Dimer-Plaketten-Kette in Kapitel 3 ist als eindimensionales Modell sehr gut mit der exakten Diagonalisierung zugängig. Durch Frustration kommt es zu Fragmentierung von Zuständen, wobei sich Eigenzustände der unendlich langen Kette durch Produkte von Zuständen endlicher Kettenstücke darstellen lassen. Damit erhält man über die exakte Diagonalisierung endlicher Kettenstücke sogar exakte Ergebnisse für den thermodynamischen Limes. Auf die sich daraus ableitenden Erkenntnisse wird deshalb in jenem Kapitel ausführlich eingegangen. Die aus der Fragmentierung resultierende treppenförmige Magnetisierungskurve ist dabei ein wesentliches in dieser Arbeit dargestelltes neues Resultat. Außerdem lassen sich auch die nicht fragmentierten Zustände sehr gut durch Extrapolation endlicher Systeme nähern. Die Dimer-Plaketten-Kette ist daher ein hervorragendes Beispiel, bei der allein durch exakte Diagonalisierung eine ganze

Reihe von genauen oder sogar exakten Ergebnissen geliefert werden konnten.

Nach den vorher gesammelten Erfahrungen mit einem eindimensionalen und einem dreidimensionalen Gitter wird in Kapitel 4 dann eine Klasse zweidimensionaler Systeme untersucht. Im Vordergrund steht die Frage, ob die zweidimensionalen Systeme einen magnetisch geordneten Grundzustand besitzen oder nicht. Da analytische Methoden oft bestimmte Annahmen an die Ordnung des Grundzustandes machen (z.B. Spinwellentheorie) und damit quasi eine Vorabentscheidung fällen, sind numerische Methoden besonders interessant, da sie für die Rechnungen keine Annahmen bezüglich der Ordnung des Systems vorraussetzen. Für den HAFM auf den archimedischen Tilings wird deshalb die Methode der exakten Diagonalisierung endlicher Gitterzellen und die Extrapolation zum thermodynamischen Grenzfall benutzt, um eine Klassifizierung der Grundzustände nach ihrer magnetischen Ordnung vorzunehmen. Dabei wird für die bekannten Gitter auf Ergebnisse aus anderen Arbeiten zurückgegriffen, die zum Teil ergänzt werden, um sie mit den Ergebnissen dieser Arbeit zu vergleichen. Die komplexeren Gitter werden hier jedoch erstmalig auf ihre Eigenschaften untersucht, die dann mit denen der anderen Gitter verglichen werden. Die Klassifizierung wird dabei durch die Verwandtschaft der Gitter erleichtert, die durch Variation der Bindungsstärken entsteht.

Das hier bearbeitete Thema läßt verschiedene Erweiterungen und Fortsetzungen zu. So sind auch Gitter auf gekrümmten Flächen denkbar, wie sie sich in der Natur beispielsweise in magnetischen Riesenmolekülen [147] finden lassen. Wegen der endlichen Größe sind sie fast ideale Objekte für die exakte Diagonalisierung. Ebenfalls möglich und aussichtsreich wäre die Erweiterung des Heisenbergmodelles durch Anisotropie (XXZ-Modell) oder ein magnetisches Feld.

Ebenso interessant ist die Untersuchung frustrierter dreidimensionaler Gitter, bei denen die Pyrochlor-Struktur als Kandidat für ein magnetisch ungeordnetes Gitter das dreidimensionale Analogon zum zweidimensionalen Kagomé-Gitter darstellt. Auch ist die Behandlung von Systemen mit hohen Quantenspinzahlen ($s > 1/2$) denkbar. Vermutlich wäre die exakte Diagonalisierung wegen der Begrenzung auf kleine Systemgrößen dann aber weniger gut geeignet, und es muß auf Nährungsmethoden zurückgegriffen werden. Interessant ist auch die Erweiterung zu quasi-zweidimensionalen Modellen mit schwacher Kopplung zwischen den Ebenen, um damit reale quasi-zweidimensionale Substanzen besser zu beschreiben. Die vorliegende Arbeit kann somit auch als Ausgangspunkt für zukünftige Arbeiten dienen. Die Anhänge A bis G liefern gleichzeitig zahlreiche Details, die bei der Einarbeitung in diese Themen nützlich sein können.

Anhang A

Der Ordnungsparameter

Der Grundzustand des Heisenberg-Ferromagneten bricht die Symmetrie des rotationsinvarianten Hamiltonoperators. Ein Ordnungsparameter für diesen geordneten Zustand ist der Erwartungswert des Gesamtspins oder die Magnetisierung $\langle \hat{\eta} \sum_i \mathbf{S}_i \rangle / N$ mit $\hat{\eta}$ (z.B. $\hat{\eta} = \mathbf{e_z}$) als Richtung der spontanen Symmetriebrechung. Sein maximaler Wert ist s. Für den Antiferromagneten auf bipartiten Gittern (z.B. Quadratgitter, Honigwabengitter) wird die Definition um einen alternierenden Faktor $\epsilon_i = \pm 1$ erweitert. Die Magnetisierung definiert sich dann mit $m^{ssb} = \langle \hat{\eta} \sum_i \epsilon_i \mathbf{S}_i \rangle / N$ analog zu [71]. *ssb* steht dabei für „spontaneous symmetry breaking". Häufig wird für m^{ssb} auch m, $m^\dagger$ [72] oder m^+ verwendet. Da für den HAFM auf endlichen bipartiten Gittern im Grundzustand m^{ssb} immer verschwindet, benutzt man bei numerischen Studien endlicher Systeme meist die Wurzel des mittleren Quadrates der Magnetisierung $m^{rms} = \sqrt{\langle (1/N^2) \sum_i (\epsilon_i \mathbf{S}_i)^2 \rangle}$ (*rms* steht für „root mean square staggered" [71]) oder, weniger üblich, die analoge Definition mit der Wurzel des mittleren Quadrates der z-Komponenten der Spins ($m_z^{rms} = \frac{1}{\sqrt{3}} m^{rms}$ für $S = 0$). Dabei nutzt man die Vermutung, daß für den thermodynamischen Limes m^{ssb} mit m^{rms} übereinstimmen sollte [71, 72]. Alternativ wird auch die Wurzel der Spinkorrelation zweier maximal entfernter Spins $C(r) = \sum_i (\epsilon_r / N) \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+r} \rangle$ benutzt. Beide Definitionen liefern im thermodynamischen Limes das gleiche Resultat und unterscheiden sich nur durch ihre Finite-Size-Korrekturen (siehe [75]).

An dieser Stelle sollen die oben erwähnten Definitionen aufgegriffen werden, um eine möglichst allgemeine Definition des Ordnungsparameters für Spinsysteme zu finden, die auch für kompliziertere nichtbipartite Gitter praktikabel ist. Das Quadrat des Ordnungsparameters $m^2 = 3M_z^2/N^2$ wird dazu als das Quadrat der Summe der mit Hilfe von $\hat{U}(\phi_i)$ gedrehten Untergitter-Spins $\mathbf{S_i}'$ definiert. In Anlehnung an die Spinwellentheorie wird der Rotationsoperator $\hat{U}(\phi_i)$ mit dem Drehwinkel ϕ_i dabei so definiert, daß nach dessen Anwendung auf den Grundzustand eines klassischen Spinsystems der Spin i in z-Richtung zeigt. Als Untergitter werden dabei diejenigen Gitterpunkte bezeichnet, deren Spins im Grundzustand des klassischen Antiferromagneten in die gleiche Richtung zeigen. Zur Vereinfachung wird dabei angenommen, daß alle Spins in der xz-Ebene liegen (planarer Zustand).

$$M_z^2 = \langle ((\mathbf{S}'_A + \mathbf{S}'_B + \mathbf{S}'_C + ...)\mathbf{e}_z)^2 \rangle \tag{A.1}$$

$$\mathbf{S}'_A = \hat{U}(\phi_A)\mathbf{S}_A = (\cos(\phi_A)S_A^x - \sin(\phi_A)S_A^z, S_A^y, \sin(\phi_A)S_A^x + \cos(\phi_A)S_A^z) \tag{A.2}$$

$\mathbf{S}_A$ ist dabei die Abkürzung für die Summe der Spins eines Untergitters $\mathbf{S}_A = \sum_{i \epsilon A} \mathbf{S}_i$. Entsprechende Abkürzungen gelten auch für weitere Untergitter B, C.

Für Néel-geordnete bipartite Systeme mit $\phi_A = 0$ und $\phi_B = \pi$ liefern die lokalen Drehungen lediglich einen Vorfaktor von ± 1, der auch „staggered"-Faktor (ϵ_i in [71], (2.46) und (2.47)) genannt wird. Damit wird Gleichung (A.1) zu

$$M_z^2 = \langle (S_A^z)^2 + (S_B^z)^2 - 2S_A^z S_B^z \rangle. \tag{A.3}$$

Der klassische Wert (O(3)-Modell) der Magnetisierung für ein Néel-geordneten Antiferromagneten ist mit dieser Definition $m = \sqrt{3M_z^2/N^2} = s$, was dem klassischen Limes der Spinwellentheorie entspricht. Für $s = 1/2$ ist dieser Wert mit $1/2$ maximal und wird im Quantenfall durch Quantenfluktuationen entsprechend reduziert. Das populärste Beispiel dafür ist der HAFM auf dem Quadratgitter [1].

Für ein tripartites Gitter mit den Untergittern A, B und C und einem klassischen Grundzustand in 120°-Ordnung mit $\phi_A = 0$, $\phi_B = 2\pi/3$ und $\phi_C = 4\pi/3$ (Dreiecksgitter) wird die Magnetisierung nach Einsetzen von (A.2) in (A.1) unter Nutzung von $\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle$ und $\langle S_i^x S_j^z \rangle = 0$

$$M_z^2 = \langle (S_A^z)^2 + (S_B^z)^2 + (S_C^z)^2 - S_A^z S_B^z - S_A^z S_C^z - S_B^z S_C^z \rangle. \tag{A.4}$$

M_z^2 ist dabei äquivalent zu einem Drittel des Strukturfaktors $S(q) = \sum_{i,j} e^{iq(r_i - r_j)} \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle$ mit $q = (4\pi/3, 0)$. Im klassischen Grenzfall ist die Magnetisierung des Dreiecksgitters mit einer $2\pi/3$-Untergitterstruktur $m = \sqrt{3M_z^2/N^2} = 2^{-1/2}s$. Da die Spinwellentheorie im klassischen Grenzfall $\langle S_z \rangle / N = s$ liefert, findet man in der Literatur auch häufig einen mit zwei multiplizierten Wert des Magnetisierunsquadrates $m^2 = S(q)/N^2$. Dieser Faktor spiegelt die Existenz der beiden äquivalenten Vektoren $\pm q = (\pm 4\pi/3, 0)$ wieder [86]. Andere Arbeiten definieren die Magnetisierung so, daß die klassische Magnetisierung normiert ($m_{cl} = 1$) ist (z.B. [90]). Da die Wahl des Vorfaktors in der Literatur nicht ganz eindeutig ist, wird hier die Magnetisierung ohne diesen Faktor definiert und ist deshalb nicht immer mit den Spinwellenwerten direkt zu vergleichen. Im Zweifelsfall orientiert man sich an dem in den Arbeiten oft angegebenen klassischen Wert der Magnetisierung.

Für Gitter mit Basis, d.h. mit mehr als einem Spin je Elementarzelle, muß die Definition erweitert werden. Als Beispiel soll hier die magnetische Ordnung des AFM auf Maple-Leaf-Gitter (T4H-Gitter, Kapitel 4.4.3) gezeigt werden. Die Elementarzelle des Maple-Leaf-Gitters enthält $N/N_0 = 6$ Spins. Der klassische Grundzustand hat sechs verschiedene Untergitter mit entsprechend sechs Drehwinkeln $\phi_{A(1,3,5)} = 0$, $\phi_{A(2,4,6)} = 5\pi/6$, $\phi_{B(1,3,5)} = 2\pi/3$, $\phi_{B(2,4,6)} = 9\pi/6$, $\phi_{C(1,3,5)} = 4\pi/3$, $\phi_{C(2,4,6)} = \pi/6$. Die Indizes A, B und C numerieren wie beim Dreiecksgitter die verschiedenen geometrischen Elementarzellen innerhalb einer magnetischen Elementarzelle. Die Ziffern 1 bis 6 numerieren die $N/N_0 = 6$ Spins einer Wigner-Seitz-Zelle (Abbildung 4.28). Beim AFM auf dem T4H-Gitter haben jeweils drei dieser auf einem Sechseck liegenden Spins (z.B. $A1$, $A3$ und $A5$

[1] Für den ($s = 1/2$)-HAFM auf dem Quadratgitter liefert die Spinwellentheorie eine Magnetisierung von $m^{ssb} = 0.3034$. Das sind etwa 61% des klassischen Wertes 1/2. In den Kupferoxidebenen der Hochtemperatursupraleiter haben die Cu^{2+} ein magnetisches Moment von $\mu(Cu^{2+}) = gs\mu_B = 1\mu_B$ mit dem gyromagnetischen Faktor $g = 2$ als einfachste Abschätzung, womit der mit Neutronenstreuung messbare Wert bei $\mu^{obs} = (m^{ssb}/0.5)\mu_B \approx 0.61\mu_B$ liegen sollte [71]. In der Tat liegen experimentelle Werte bei $0.6\mu_B$ [57, 58], wobei angenommen wird, daß zusätzliche Wechselwirkungen in die dritte Raumrichtung die Ordnung auch für $T > 0$ ermöglichen. Im zweidimensionalen Heisenbergmodell ist wegen dem Mermin-Wagner-Theorem [51] für $T > 0$ keine magnetische Ordnung möglich.

in Abbildung 4.28) die gleiche Ausrichtung. Die Magnetisierung wird somit durch

$$M_z^2 = \sum_{i,j}^{N_0} \sum_{n,m}^{N/N_0} \cos(\phi_{in} - \phi_{jm}) \langle S_{in}^z S_{jm}^z \rangle \tag{A.5}$$

mit den Indizes i, j (Nummer der Einheitszelle) und n, m (Spins 1 bis 6 innerhalb der Einheitszelle) bestimmt. Sind alle Spins einer Elementarzelle äquivalent, eignet sich auch die dem Strukturfaktor äquivalente Variante

$$M_z^2(n = m = 1) = \left(\frac{N}{N_0}\right)^2 \sum_{i,j}^{N_0} \cos(\phi_{i1} - \phi_{j1}) \langle S_{i1}^z S_{j1}^z \rangle \tag{A.6}$$

mit den Indizes $n = m = 1$, die beim T4H-Gitter eine dem Dreiecksgitter adäquate Definition der Magnetisierung liefert. In beiden Definitionen liefert der klassische Grenzfall für das T4H-Gitter die gleiche Magnetisierung wie beim Dreiecksgitter $m = \sqrt{3M_z^2/N^2} = \sqrt{1/2}\, s$.

Die Winkeldifferenz läßt sich auch als klassische Spin-Spin-Korrelation

$$s^2 \cos(\phi_i - \phi_j) = (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j)_{cl} \tag{A.7}$$

mit der klassischen Spinlänge s ausdrücken, wodurch man einen sehr einfachen generalisierten Ordnungsparameter

$$M_z^2 = \sum_{i,j}^{N_0} \sum_{n,m}^{N/N_0} ((\mathbf{S}_{in} \mathbf{S}_{jm})_{cl} \langle S_{in}^z S_{jm}^z \rangle_{qm} / s^2) \tag{A.8}$$

mit den klassischen (cl) und quantenmechanischen (qm) Paarkorrelationen erhält. Der klassische Wert des Ordnungsparameters berechnet sich dann nach

$$M_{z,cl}^2 = \frac{1}{s^4} \sum_{i,j}^{N_0} \sum_{n,m}^{N/N_0} (\mathbf{S}_{in} \mathbf{S}_{jm})_{cl}^2. \tag{A.9}$$

Für Systeme, bei denen die zugrunde liegende klassische Ordnung kompliziert oder nicht bekannt ist, sollte die absolute Magnetisierung oder dessen Quadrat

$$(M_z^+)^2 = \sum_{i,j}^{N_0} \sum_{n,m}^{N/N_0} |\langle S_{in}^z S_{jm}^z \rangle| \tag{A.10}$$

ebenfalls ein geeigneter Ordnungsparameter sein. Statt des vom Ordnungszustand des klassischen Systems abhängigen Vorfaktors vor den summierten Paarkorrelationen verwendet man einfach den Betrag der Paarkorrelation. Dadurch erhalten in klassischen Systemen schwach korrelierte Spinpaare ein höheres Gewicht in der Magnetisierung[2].

Für bipartite Systeme ist der Ordnungsparameter $\sqrt{3(M_z^+)^2/N^2}$ identisch zur staggered Magnetisierung m^{rms}. Bei tripartiten Systemen (Dreiecksgitter) haben die Korrelationen zwischen verschiedenen Untergittern in $(M_z^+)^2$ ein doppelt so hohes Gewicht wie in M_z^2, daher ist der numerische Wert nicht direkt miteinander vergleichbar. Für das Dreiecksgitter im klassischen Limes

[2] Alternativ könnte man auch das Quadrat der Paarkorrelationen summieren.

ist $(m_{cl}^+)^2 = 3(M_z^+)^2/N^2 = 2/3\,s^2$ und damit um den Faktor 4/3 größer als $(m_{cl})^2 = 1/2\,s^2$. Für den HAFM auf dem Dreiecksgitter gilt im Grundzustand mit $\langle S^2\rangle = 0$ wie im klassischen Fall die Relation $(m^+)^2 = 4/3\,m^2$, so daß auch hier Definition A.10 verwendet werden kann[3] . Definition A.10 steht also in einfacher Relation zu den üblichen Definitionen (Quadrat und Dreiecksgitter), hat jedoch den Vorteil unabhängig von der klassischen Ordnung oder vom Wellenvektor q beim Strukturfaktor $S(q)$ zu sein. Damit eignet sich $(M_z^+)^2$ auch für Systeme, die eine kompliziertere magnetische Ordnung haben (Maple-Leaf-Gitter) oder die im klassischen Fall einen entarteten Grundzustand (Kagomé-Gitter) besitzen.

Für den HAFM auf den archimedischen Tilings wird hier bevorzugt die mittels Beträgen definierte Magnetisierung

$$m^+ = \sqrt{\frac{(M^+)^2}{N^2}} = \left(\frac{1}{N^2}\sum_{i,j}^{N_0}\sum_{n,m}^{N/N_0} |\langle \mathbf{S}_{in}\mathbf{S}_{jm}\rangle|\right)^{1/2} \tag{A.11}$$

verwendet, da sie ohne Probleme auf alle Tilings anwendbar ist.

[3] Im Grundzustand gilt $\langle S_A S_A\rangle = \langle S_B S_B\rangle = \langle S_C S_C\rangle > 0$ und $\langle S_A S_B\rangle = \langle S_B S_C\rangle = \langle S_C S_A\rangle < 0$. Damit können die Beträge in Gleichung A.10 ersetzt werden und man erhält $(M^+)^2 = \langle S_A S_A\rangle + \langle S_B S_B\rangle + \langle S_C S_C\rangle + 2(\langle S_A S_B\rangle + \langle S_B S_C\rangle + \langle S_C S_A\rangle)$. Mittels $\langle S^2\rangle = \langle S_A S_A\rangle + \langle S_B S_B\rangle + \langle S_C S_C\rangle + 2(\langle S_A S_B\rangle + \langle S_B S_C\rangle + \langle S_C S_A\rangle) = 0$ kann $M^2 = \langle S_A S_A\rangle + \langle S_B S_B\rangle + \langle S_C S_C\rangle + 2(\langle S_A S_B\rangle + \langle S_B S_C\rangle + \langle S_C S_A\rangle) = (9/2)\langle S_A S_A\rangle - (1/2)\langle S^2\rangle$ dann leicht mit $(M^+)^2 = 6\langle S_A S_A\rangle - \langle S^2\rangle$ in Relation $(M^+/M)^2 = 4/3$ gebracht werden.

Anhang B

Exakte Diagonalisierung

Zur Berechnung der niedrigsten Energien und der zugehörigen Eigenzustände wurde die Standard-Lanczos-Technik [148, 149, 40] benutzt. Der Algorithmus erzeugt iterativ eine tridiagonale Matrix T und eine Transformationsmatrix V mit $VT = HV$, aus der die niedrigsten Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmt werden.
Zunächst soll die hier verwendete Basic-Lanczos-Rekursion erläutert werden. Ausgangspunkt der Rekursion ist eine n-spaltige hermitesche Matrix H und ein zufällig generierter Startvektor v_1. Dieser Vektor soll einen nicht verschwindenden Überlapp mit dem Grundzustandsvektor besitzen. Daraus wird durch schrittweise Iteration eine tridiagonale $(m \times m)$-Matrix T_m (auch Lanczos-Matrix genannt) mit $m \leq n$ erzeugt.

$$T_m = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & & & \\ b_2 & a_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b_m \\ & & & b_m & a_m \end{bmatrix} \tag{B.1}$$

Die Transformation sieht in Matrixschreibweise wie folgt aus:

$$T_m = V_m^{-1} H V_m \qquad \text{oder} \qquad V_m T_m = H V_m \tag{B.2}$$

$V_m = [v_1, v_2, \ldots, v_m]$ ist die Transformationsmatrix mit m Spaltenvektoren v_1, v_2, $\ldots$, v_m (auch Lanczos-Vektoren genannt). Aus Formel (B.2) erhält man durch Aufspaltung in Spalten folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} Hv_1 &= a_1 v_1 + b_2 v_2 \\ Hv_2 &= b_2 v_1 + a_2 v_2 + b_3 v_3 \\ Hv_3 &= b_3 v_2 + a_3 v_3 + b_4 v_4 \\ &\vdots \\ Hv_{m-1} &= b_{m-1} v_{m-2} + a_{m-1} v_{m-1} + b_m v_m \\ Hv_m &= b_m v_{m-1} + a_m v_m \quad . \end{aligned} \tag{B.3}$$

Dieses Gleichungssystem läßt sich durch Auflösen jeder Zeile nach dem letzten Lanczos-Vektor in eine iterative Form überführen

$$
\begin{aligned}
v_2 &= (Hv_1 - a_1 v_1)/b_2 \\
v_3 &= (Hv_2 - a_2 v_2 - b_2 v_1)/b_3 \\
&\vdots \\
v_m &= (Hv_{m-1} - a_{m-1} v_{m-1} - b_{m-1} v_{m-2})/b_m \quad .
\end{aligned}
\tag{B.4}
$$

Für eine vereinfachte Schreibweise definiert man zusätzlich $b_1 = 0$ und $v_0 = 0$. Die Koeffizienten a_i und b_i mit $i = 1 \ldots m$ werden so gewählt, daß jeder Lanczos-Vektor v_i orthogonal bezüglich seiner Vorgängervektoren v_{i-1} und v_{i-2} ist.

$$a_i \stackrel{\text{def}}{=} v_i^T H v_i \tag{B.5}$$

$$b_{i+1} \stackrel{\text{def}}{=} v_{i+1}^T H v_i \tag{B.6}$$

$$b_{i+1} v_{i+1} = Hv_i - a_i v_i - b_i v_{i-1} \tag{B.7}$$

Die Lanczos-Prozedur generiert also in jedem Schritt zu einer hermitischen Matrix H eine tridiagonale symmetrische Matrix T_m. Diese benötigt wesentlich weniger Speicherplatz als die Ausgangsmatrix und ist bedeutend einfacher strukturiert. Im Programm [151] wird sie in zwei (Quasi-) Vektoren gespeichert. Zu dieser Matrix T_m können nun die Eigenwerte μ berechnet werden. Für $m \leq n$ stellt der Eigenwert von T eine Näherung des Eigenwertes für H dar. Mittels inverser Iteration können dann die zu μ korrespondierenden Eigenvektoren u berechnet werden.

$$T_m u = \mu u \tag{B.8}$$

Der Vektor

$$y = V_m u \tag{B.9}$$

stellt dann eine Näherung für den gesuchten Eigenvektor der Matrix H dar. In der Praxis reichen oft $m = 100 \ldots 200$ Iterationen, um die niedrigsten zwei Eigenwerte mit einer Genauigkeit von sechs Dezimalstellen zu erhalten. Das Lanczos-Verfahren hat nun zwei wichtige Eigenschaften, die es für die Berechnung großer Systeme besonders nützlich machen:

1. H geht nur über Hv_i in die Berechnung ein. Bei schwach besetzten Matrizen bedeutet das eine zu n proportionale Rechenzeit.

2. Jede Iteration benötigt nur die zwei letzten berechneten Lanczos-Vektoren v_{i-1} und v_{i-2}.

Ist v_1 ein Startvektor mit von Null verschiedenen Overlapp zu den Eigenvektoren von H, so gilt [40] für jedes $m \leq n$ bei exakter Arithmetik

$$V_m^T V_m = I_m \qquad \text{und} \qquad T_m = V_m^T H V_m. \tag{B.10}$$

Das heißt, daß H im Raum der Vektoren v_1, $v_2 \ldots v_m$ durch T_m repräsentiert wird.

In Abbildung B.1 ist die Berechnungsdauer in Abhängigkeit von der Dimension des Hilbertraumes n für eine konkrete Implementierung des Lanczos-Algorithmus aufgetragen. Die Dimension

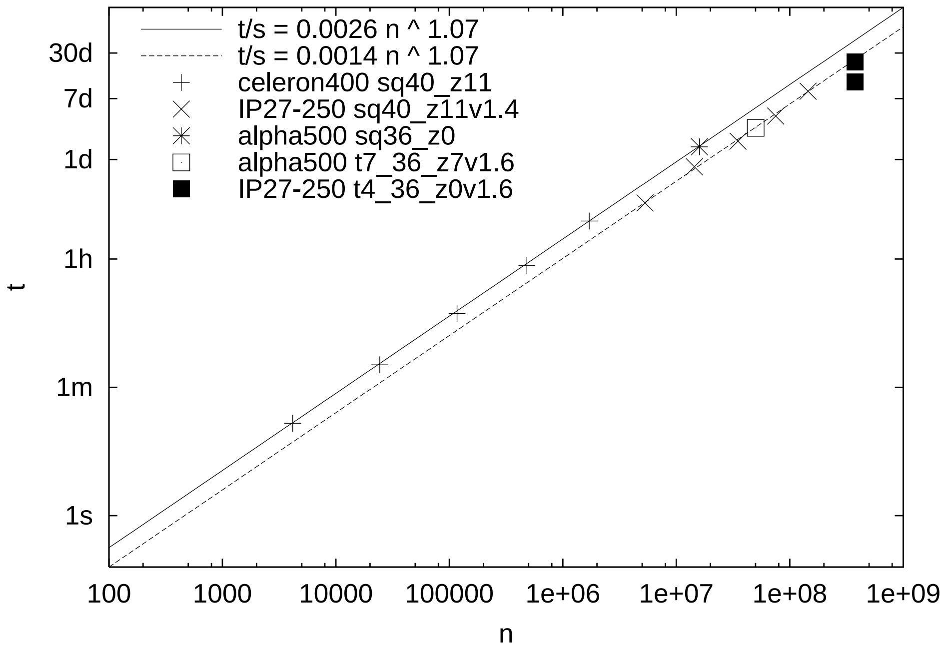


Abbildung B.1: Berechnungsdauer t für die Berechnung der kleinsten Eigenwerte einer $(n \times n)$-Matrix mit dem Lanczos-Verfahren. Dargestellt sind die tatsächlich benötigten Laufzeiten für das Programmpaket „spinpack"[151] auf verschiedenen Rechnerplattformen für verschiedene Heisenberg-Spin-1/2-Systeme. Die Abhänggigkeit der Rechenzeit von n ist fast linear ($t \propto n^{1.07}$). Die verschiedenen Linien beziehen sich auf Ergebnisse auf verschiedenen Rechnerarchitekturen. Die durchgezogene Linie entspricht einem auf Intel basierenden System mit einem Celeron-Processor mit 400 MHz. Die gestrichene Linie ist ein SGI-System (Origin O2100) mit 8 IP27 Processoren (CPU: MIPS R10000 Rev3.4, FPU: MIPS R10010 Rev3.4, 4MB cache, Nutzung eines Prozessors), die mit 250MHz getaktet sind.

des Hilbertraumes n wächst exponentiell mit der Anzahl der Teilchen. Durch Nutzung von Symmetrien kann man n jedoch meist um ein paar Größenordnungen reduzieren. Das macht sich insbesondere bei Quadrat- und Dreiecksgitter bemerkbar, da hier die Einheitszelle nur einen Spin enthällt. Die größten berechneten (s=1/2)-Systeme haben mit $N = 36$ (Dreiecksgitter) oder $N = 40$ (Quadratgitter) Spins $n \approx 4 \cdot 10^8$ Komponenten je Lanczos-Vektor und benötigten 6GByte RAM zur Speicherung der Lanczos-Vektoren v_i und v_{i-1} (32bit je Komponente) und deren Basis (40bit je Konfiguration) und etwa 80GByte Festplatte zur Speicherung der von Null verschiedenen Matrixelemente des Hamiltonoperators H.

Entscheidend für die Dauer der Berechnung ist deshalb zum größten Teil die Lesegeschwindigkeit von den Festplatten. Wenn mehrere Prozesse mit Lese- und Schreiboperationen auf den gleichen Rechnern rechnen, bricht die Rechenleistung entsprechend schnell ein. Ein weiteres Problem ist die Nutzung mehrerer Prozessoren, wenn nur ein Festplattensystem zur Verfügung steht. Auch hier müßten sich die verschiedenen Threads (parallel abgearbeitete Programmstücke) die Bandbreite zur Festplatte teilen.

Abhilfe dafür könnte zum einen die Nutzung von Rechner-Clustern sein, bei denen jeder Rechner seinen eigenen Festplattenspeicher besitzt, auf dem ein Teil der Hamiltonmatrix abgelegt wird. Rechner-Cluster haben gegenüber shared-memory-Rechnern (mehrere Prozessoren, gemeinsamer Hauptspeicher) einen großen Preisvorteil. Nachteilig ist der höhere Programmieraufwand und die langsamere Kommunikation der Prozesse untereinander. Als Alternative könnte man auf die Speicherung der Hamiltonmatrix auf Festplatte verzichten. Mit der jetzigen Implementierung würde das zwar eine um etwa den Faktor zehn erhöhte Rechendauer bedeuten, dieser ließe sich jedoch durch Nutzung mehrerer Prozessoren (mehr als 10) wieder kompensieren. Ein weiterer Pluspunkt für diese Variante ist, daß er mehr Ansatzstellen für Optimierungen an Algorithmen bietet, die meist deutlich bessere Erfolge erzielen als der Einsatz neuer, meist auch sehr teurer Hardware.

Der größte Rechenaufwand fällt dann bei der bisherigen Implementierung [151] auf die Bestimmung des Indexes für den Lanczos-Vektor aus der Spinkonfiguration unter Nutzung der Punktsymmetrien (siehe dazu auch [150] und Anhang in [22] für Ketten, für beliebige Gitter und Symmetrien ist der Aufwand jedoch größer). Erste Abschätzungen zeigen, daß mit den derzeit verfügbaren Rechnern $N = 40$ (alle S^z-Unterräume beim vollsymmetrischen und Grundzustand und Anregung bei weniger symmetrischen Gitterzellen) auf dem Quadratgitter und $N = 36$ auf den komplexeren Gittern zu bewältigen sind.

Anhang C

Néel-Ordnung und endliche Systeme

C.1 Der Pisa-Turm

In diesem Abschnitt soll ein kurzer Überblick gegeben werden, welche Eigenschaften die Energiespektren endlicher Quantenspinsysteme mit periodischen Randbedingungen haben, die im thermodynamischen Limes bei $T = 0$ eine Néel-artige langreichweitige Ordnung (LRO) besitzen. Üblicherweise werden mittels numerischer Verfahren zuerst die interessierenden Eigenschaften endlicher Systeme verschiedener Größe berechnet, die in einem zweiten Schritt zum thermodynamischen Limes extrapoliert werden. Daher ist es wichtig, die Natur der Symmetriebrechung zu verstehen. Die folgenden Erläuterungen dazu basieren im wesentlichen auf den Arbeiten der Gruppe um Claire Lhuillier [101, 84, 85, 111, 97].

Der Néel-Zustand bricht die $SU(2)$ und räumliche Symmetrien des Hamiltonoperators H. Der Néel-Zustand kann jedoch nicht der Grundzustand für endliche Systeme sein. So besagt das Lieb-Mattis-Theorem [16], daß bipartite endliche Systeme einen rotationsinvarianten ($S = 0$) Grundzustand besitzen, der die Symmetrie des Hamiltonoperators nicht bricht. Beim Übergang von endlichen Systemen zum thermodynamischen Limes muß der Néel-Zustand daher durch Überlagerung von Eigenzuständen mit verschiedenen Irreduziblen Darstellungen (IR) der räumlichen Symmetriegruppe und verschiedenen Gesamtspins S gebildet werden.

Da die Dynamik des Néel-Ordnungsparameters die eines kräftefreien Kreisels ist, skalieren die entsprechenden niedrigsten Energien wie

$$E_{min}(S) \simeq \frac{S(S+1)}{N\chi_0} \tag{C.1}$$

mit χ_0 als Suszeptibilität pro Platz bei verschwindenem Magnetfeld ($\chi_0 = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle 2S \rangle}{\partial B}\Big|_{B=0}$). Bei festem S kollabieren diese Zustände schneller zum Grundzustand im thermodynamischen Limes als die „softest magnons“ (Magnonen mit der Energie $E^M_{min} = c|\mathbf{k}_{min}|$ mit c als kleinster Spinwellengeschwindigkeit und $|\mathbf{k}_{min}| \sim \frac{1}{L}$ als kleinstmöglichem endlichen Wellenvektor, den die periodischen Randbedingungen des endlichen Gitters erlauben, wobei für zweidimensionale Systeme $L = \sqrt{N}$ gilt). Die Energie dieser Magnonen kollabiert für zweidimensionale Systeme mit

$$E^M_{min} \simeq \frac{c}{\sqrt{N}} \tag{C.2}$$

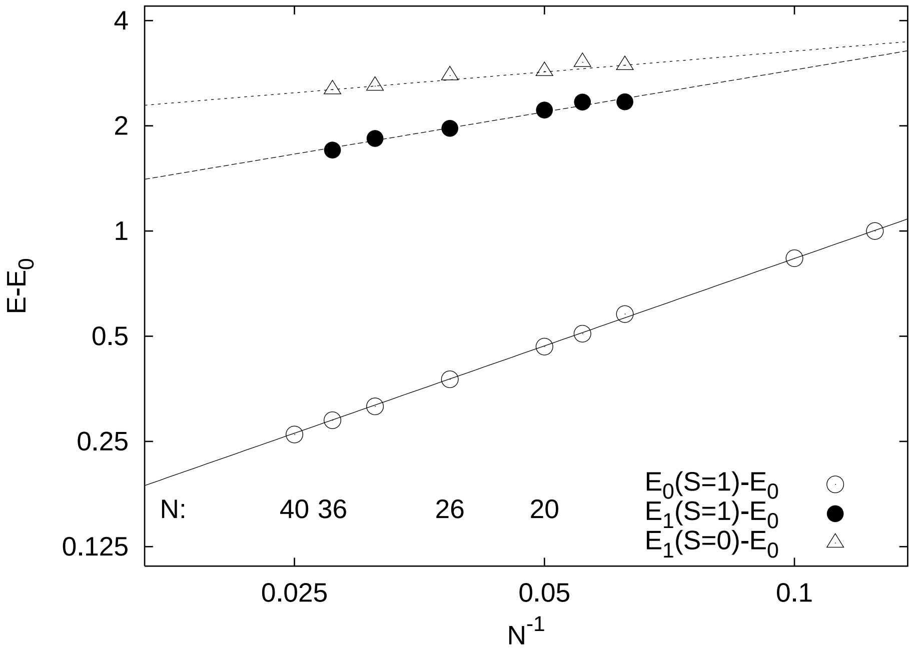


Abbildung C.1: Abhängigkeit der niedrigsten Anregungen beim HAFM auf endlichen Quadratgittern mit periodischen Randbedingungen von der Systemgröße N in doppelt-logarithmischer Darstellung. Die kleinste Anregung $E_0(S = 1) - E_0$ skaliert mit $5.64(10)N^{-0.830(7)}$ (Theorie [44, 34, 97]: $E \sim N^{-1}$), die kleinste Magnonanregung $E_1(S = 1) - E_0$ mit $7.26(68)N^{-0.400(30)}$ (Theorie [97]: $E \sim N^{-1/2}$) und die kleinste Singulettanregung $E_1(S = 0) - E_0$ mit $5.16(6)N^{-0.198(4)}$ (nur Systeme mit $N \bmod 4 = 0$ und vorhandenem Punkt $Q = (0, \pi)$).

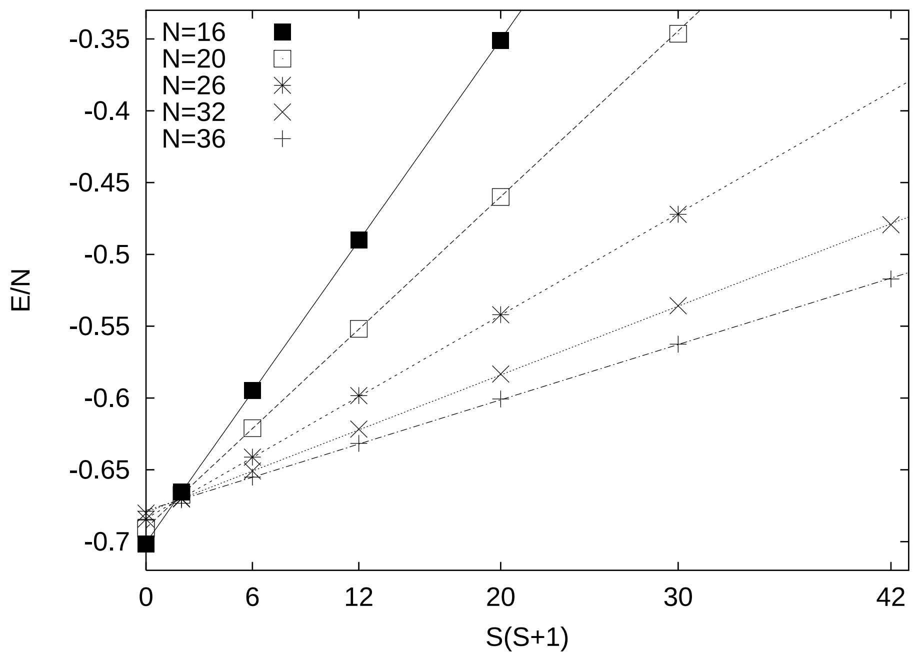


Abbildung C.2: Energie der quasientartete Zustände (QDJS) in Abhängigkeit von $S(S+1)$ für kleine S. Die Energien liegen in guter Näherung auf einer Geraden, deren Neigung mit wachsender Systemgröße N wächst.

somit langsamer als $E_{min}(S) \propto \frac{1}{N}$ aus Gleichung C.1. Abbildung C.1 zeigt als typisches Beispiel die Abhängigkeit verschiedener Anregungen des HAFM auf dem Quadratgitter. Die mit C.1 kollabierenden Zustände nennt man auch quasientartete Zustände (QDJS). Sie liegen in einem Energie-$S(S+1)$-Diagramm für kleine S etwa auf einer Geraden, deren Neigung mit wachsender Systemgröße N wächst, weshalb man sie auch als „tower of states“ (Abk. TOS) oder Pisa-Turm bezeichnet. Abbildung C.2 zeigt die zunehmende Neigung des Pisa-Turms am Beispiel des HAFM auf dem quadratischen Gitter. Analoge Darstellungen für den HAFM auf dem Honigwabengitter findet man in [97].

C.2 Darstellung des Energiespektrums

Gleichung (C.1) des vorhergehenden Abschnittes beschreibt in guter Näherung, wie sich die Energie in Abhängigkeit von der Quantenzahl S verhält. Um für alle S die niedrigsten Energien und Anregungen (Abbildung C.3a) möglichst übersichtlich und dennoch kompakt darzustellen, wurde für die Abszisse $x_S = S(S+1)/(S_{max}(S_{max}+1))$ mit $S_{max} = Ns = N/2$ gewählt (Abbildung C.3b) und $a_1 x_S$ von der Energie abgezogen (Abbildung C.3c). Die Konstante a_1 wird so gewählt, daß die minimalen Energien für kleinstes und größtes S auf einer Horizontalen liegen. Dadurch sind die kleinsten Anregungen gut erkennbar. Variante (c) wird in dieser Arbeit bevorzugt. Man sieht deutlich, daß in dieser Darstellung die Kurve $E(x_S)$ etwa quadratisch von x_S (und damit in vierter Ordnung von S) abhängt. Abbildung C.3d zeigt die Energiedifferenzen zur jeweils kleinsten Energie des S-Sektors. In allen Darstellungen sind die Energien mit ver-

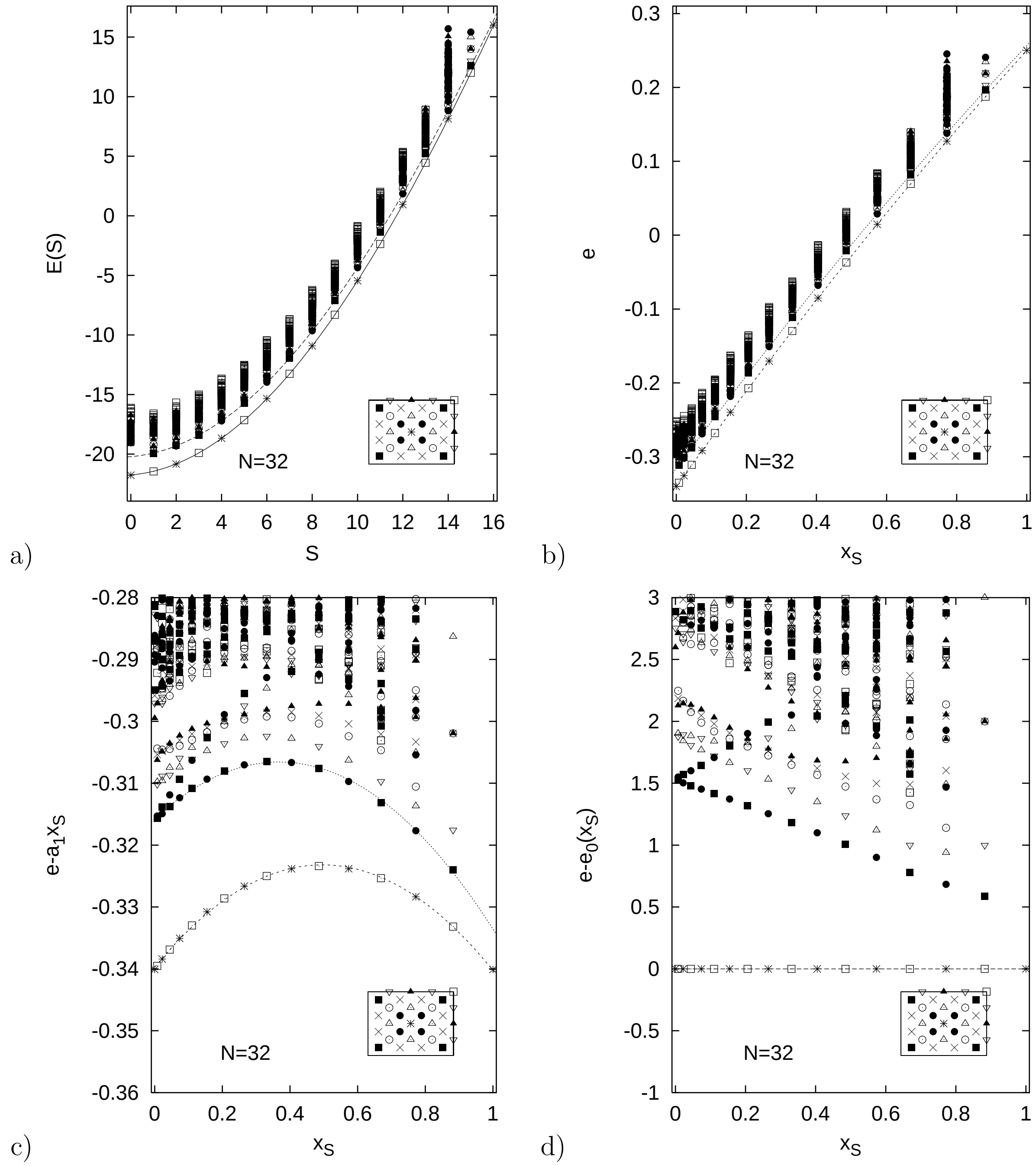


Abbildung C.3: Verschiedene Darstellungen des Energiespektrums $E(S)$ des HAFM auf dem Quadratgitter mit $N = 32$ Plätzen. Beginnend von oben links nach unden rechts: (a) Energie E über S mit gut zu erkennender quadratischer Abhängigkeit, (b) Darstellung der Energie pro Bindung $e = E/N_{nn}$ über x_S mit $x_S = X_S/X_{S,max}$ (normiert), $X_S = S(S+1)$ und $X_{S,max} = Ns(Ns+1)$, (c) zur besseren Wiedergabe der kleinsten Anregungen für jedes S wurde ein linearer Term a_1x_S abgezogen, (d) Darstellung der Differenz zur jeweils kleinsten Energie des entsprechenden S-Sektors. Unten rechts in jedem Diagramm befindet sich die Brillouin-Zone mit den für das endliche Gitter auftretenden k-Punkten.

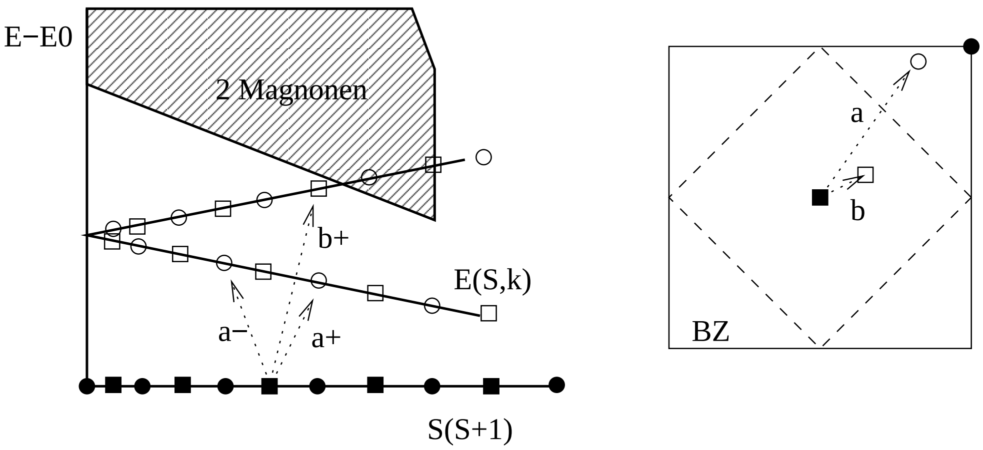


Abbildung C.4: Typisches Spektrum für einen endlichen Antiferromagneten mit Néel-Ordnung (siehe Text). Aufgetragen ist die Energiedifferenz zur Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von $S(S+1)$. Bei etwa der zweifachen Ein-Magnon-Energie $E(S,k)$ findet man ein Kontinuum von Zuständen, die sich Zwei- und Mehr-Magnon-Zuständen zuordnen lassen. Rechts ist die Brillouin-Zone (BZ) mit den zwei kleinsten möglichen Magnonanregungen schematisch dargestellt. $a+$ und $a-$ sind Magnonanregungen, die aus der magnetischen Brillouin-Zone (gestrichelte Linien im rechten Bild) führen, $b+$ und $b-$ sind Anregungen innerhalb der magnetischen Brillouin-Zone, wobei $+/-$ für die Erhöhung/Verringerung von S um 1 steht.

schiedenen Translationssymmetrien durch verschiedenartige Symbole markiert. An der jeweils rechts unten eingetragenen Brillouin-Zone kann man die zugehörigen Impulsvektoren **k** ablesen. Für das hier ausgewählte Beispiel mit einer p4m-symmetrischen Gitterzelle mit $N = 32$ Plätzen sind das genau 9 symmetrisch verschiedene Impulsvektoren. Für jedes S und jeden Impulsvektor sind mindestens die zwei niedrigsten Energien berechnet worden. Somit findet man die niedrigsten Ein-Magnon-Anregungen und erkennt den Bereich hoher Punktdichten, wo die Mehr-Magnon-Anregungen beginnen.

Die Differenz der Ein-Magnon-Energie zum Grundzustand, dargestellt in Bild C.3d, zeigt eine nahezu lineare Abhängigkeit von $S(S+1)$. Die zu $S = 0$ extrapolierte Ein-Magnon-Energie $E(k)$ stimmt gut mit der Magnondispersion der Spinwellentheorie überein. Mit wachsendem S kann man sowohl einen fallenden als auch einen steigenden Zweig finden. Zur besseren Veranschaulichung ist diese Eigenschaft des Energiespektrums in Bild C.4 noch einmal schematisch dargestellt. In diesem Schema ist nur die kleinste Magnonenergie ($k \approx 1/\sqrt{N}$) dargestellt und das Kontinuum der Mehr-Magnon-Zustände angedeutet. Dieses Kontinuum startet bei etwa der doppelten kleinsten Ein-Magnon-Energie und ist oben durch die maximale Energie jedes S-Sektors begrenzt. Die Abhängigkeit der zwei dargestellten Ein-Magnon-Zweige von S erinnert an die Zeeman-Aufspaltung und läßt sich als eine Wechselwirkung der Magnonen mit dem Gesamtspin des Systems interpretieren. Bei den höher liegenden Ein-Magnon-Anregungen mit anderen Impulsvektoren ist sowohl die Linearität als auch die Aufspaltung geringer oder gar nicht ausgeprägt und daher nicht im Schema C.4 eingetragen.

Anhang D

Symmetrien auf dem Quadratgitter

Das Hauptproblem bei der exakten Diagonalisierung (Anhang B) ist der mit der Teilchenzahl N exponentiell wachsende Speicher- und Berechnungsaufwand. Um diesen Aufwand zu reduzieren, können verschiedene Symmetrien genutzt werden. Durch Symmetrisierung der Basis zerfällt die Hamiltonmatrix in Blöcke, die getrennt diagonalisiert werden. Damit ist eine drastische Vereinfachung verbunden. Unter Symmetrien verstehe ich dabei alle mit dem Hamiltonoperator H vertauschenden Operatoren. Im einfachsten Fall sind das die S^z- und S^2-Symmetrien für isotrope Heisenbergsysteme. Im folgenden geht es jedoch im wesentlichen um die Anwendung topologischer beziehungsweise Gitter-Symmetrien.

Diese Symmetrien können als Permutationen der Platzindizes verstanden werden. Sie entsprechen Verschiebungen, Drehungen, Spiegelungen und Kombinationen dieser Bewegungen auf dem geometrischen Gitter. Symmetrien spielen in der Physik eine wichtige Rolle, da sie viele Sachverhalte wesentlich vereinfachen und verständlicher machen.

Unter Nutzung aller Gittersymmetrien kann dann teilweise sogar das gesamte Eigenenergiespektrum endlicher Gitterzellen bestimmt werden. So wurde von Bernu *et al.* [87] das vollständige Spektrum des Dreiecksgitters bis $N = 21$ berechnet.

In den folgenden Abschnitten findet man eine detailliertere Beschreibung zu den Punktsymmetrien des Quadratgitters, die sich leicht für die anderen Gitter verallgemeinern läßt. Es werden die grundlegenden Begriffe der Symmetrie erläutert.

D.1 Punktgruppen

Punktgruppen beschreiben Bewegungsgruppen ohne Translationen. Dabei bleibt mindestens ein Punkt fest, woher die Bezeichnung Punktgruppen stammt. Zu den Punktgruppen gehört die zyklische Gruppe und die Diedergruppe. Die zyklische Gruppe C_n, $n = 1, 2, 3, \dots$ besteht aus Drehungen um Winkel α, 2α, ... , $n\alpha$ mit $\alpha = 2\pi/n$ und wird vereinfacht auch mit dem Symbol n dargestellt. Die Diedergruppen D_n mit $n = 1, 2, 3, 6$ bestehen aus der zyklischen Gruppe C_n und n Spiegelungen, wobei benachbarte Spiegelachsen den Winkel $2\pi/n$ einschließen.

D.2 Punktgruppe des Quadratgitters

Die Punktgruppe des Quadratgitters ist die Gruppe D_4 (Schönfließnotation) oder $4mm$ (internationale Notation), bestehend aus einer C_4 Symmetrie, zwei um $2\pi/4$ gedrehten Spiegelebenen σ und σ' (diagonal) und zwei weiteren um $2\pi/4$ gedrehten Spiegelebenen σ'' und σ''' (horizontal und vertikal). Das Quadratgitter ist invariant unter Anwendung jeder Symmetrieoperation aus der Diedergruppe D_4 (Abb. D.1).

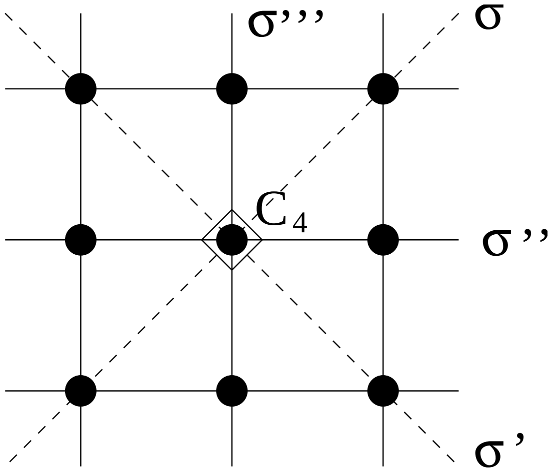


Abbildung D.1: Durch das Symmetriezentrum verlaufende Symmetrieachsen des Quadratgitters.

D.2.1 Matrixdarstellung der Punktsymmetrien

Die folgende Gleichung

$$\begin{pmatrix} r'_x \\ r'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_x \\ r_y \end{pmatrix} \qquad \mathrm{Det}(u) = \pm 1 \tag{D.1}$$

zeigt, wie die Symmetrieoperationen der Punktgruppe in Matrixform dargestellt werden können. Beispielsweise wird die Rotation C_n (C_n ist hier nicht Gruppensymbol!) durch die Matrix

$$C_n = \begin{pmatrix} \cos 2\pi/n & -\sin 2\pi/n \\ \sin 2\pi/n & \cos 2\pi/n \end{pmatrix} \tag{D.2}$$

dargestellt. Im Folgenden findet man alle Symmetrien des Quadratgitters. Auf der rechten Seite findet man einen 3x3 Ausschnitt des Quadratgitters mit numerierten Gitterplätzen, um die Wirkung der jeweiligen Symmetrien zu veranschaulichen. Für die Drehungen (E bis C_2) ist die Determinante positiv. Für Operationen, die Spiegelungen enthalten, ist die Determinante negativ (σ bis σ''').

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{matrix} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{matrix} \qquad \mathrm{Det}(u) = +1$$

$$C_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 8 & 7 & 6 \\ 1 & 0 & 5 \\ 2 & 3 & 4 \end{array}$$

$$C_4^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 8 & 7 & 6 \\ 1 & 0 & 5 \\ 2 & 3 & 4 \end{array}$$

$$C_2 = C_4^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 6 & 5 & 4 \\ 7 & 0 & 3 \\ 8 & 1 & 2 \end{array}$$

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 6 & 7 & 8 \\ 5 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 2 \end{array} \qquad \mathrm{Det}(u) = -1$$

$$\sigma' = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 5 \\ 8 & 7 & 6 \end{array}$$

$$\sigma'' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 4 & 5 & 6 \\ 3 & 0 & 7 \\ 2 & 1 & 8 \end{array}$$

$$\sigma''' = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{array}{ccc} 2 & 1 & 8 \\ 3 & 0 & 7 \\ 4 & 5 & 6 \end{array} \Rightarrow \begin{array}{ccc} 8 & 1 & 2 \\ 7 & 0 & 3 \\ 6 & 5 & 4 \end{array}$$

D.2.2 Gruppentabelle G

Durch Multiplikation von Symmetrieoperationen erhält man neue Symmetrieoperationen. Die Gruppentabelle G (Tabelle D.1) stellt die Symmetrieoperationen und deren Produkte dar. Dabei müssen die Produkte zweier Elemente aus der Symmetriegruppe selber Elemente der Gruppe sein. Ebenfalls aus der Gruppentabelle ersichtlich ist, daß das Produkt von der Reihenfolge der Faktoren abhängen kann. Das ist der Fall bei nichtvertauschenden (unverträglichen) Symmetrien.

D.2.3 Äquivalenzklassen

Symmetrien mit gleichen Gruppeneigenschaften gehören der gleichen Äquivalenzklasse (auch kurz Klasse) K an. Zwei Gruppenelemente u_{k1} und u_{k2} sind zueinander äquivalent, wenn $u_{k1}g_i = g_iu_{k2}$ mit $g_i \in G$ gilt. Sie gehören dann zu einer Klasse K_k und haben die gleiche Zyklenlänge z_k. Die fünf Äquivalenzklassen der Diedergruppe D_4 ist in Tabelle D.2 dargestellt.

Tabelle D.1: Gruppentabelle der D_4-Gruppe. Die über den Spalten aufgeführten Symmetrieoperatoren müssen zuerst angewendet werden.

2.\1.	E	C_4	C_4^{-1}	C_2	σ	σ'	σ''	σ'''
E	E	C_4	C_4^{-1}	C_2	σ	σ'	σ''	σ'''
C_4	C_4	C_2	E	C_4^{-1}	σ'''	σ''	σ	σ'
C_4^{-1}	C_4^{-1}	E	C_2	C_4	σ''	σ'''	σ'	σ
C_2	C_2	C_4^{-1}	C_4	E	σ'	σ	σ'''	σ''
σ	σ	σ''	σ'''	σ'	E	C_2	C_4	C_4^{-1}
σ'	σ'	σ'''	σ''	σ	C_2	E	C_4^{-1}	C_4
σ''	σ''	σ'	σ	σ'''	C_4^{-1}	C_4	E	C_2
σ'''	σ'''	σ	σ'	σ''	C_4	C_4^{-1}	C_2	E

(D.3)

Tabelle D.2: Äquivalenzklassen K der Diedergruppe D_4

g_i :	E	C_4	C_4^{-1}	C_2	σ	σ'	σ''	σ'''		
u_k	$g_i u_k g_i^{-1}$								K_k	z_k
E	E	E	E	E	E	E	E	E	K_1	1
C_4	C_4	C_4	C_4	C_4	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4^{-1}	K_2	4
C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4^{-1}	C_4	C_4	C_4	C_4	K_2	4
C_2	C_2	C_2	C_2	C_2	C_2	C_2	C_2	C_2	K_3	2
σ	σ	σ'	σ'	σ	σ	σ	σ'	σ'	K_4	2
σ'	σ'	σ	σ	σ'	σ'	σ'	σ'	σ	K_4	2
σ''	σ''	σ'''	σ'''	σ''	σ''	σ'''	σ''	σ''	K_5	2
σ'''	σ'''	σ''	σ''	σ'''	σ'''	σ''	σ''	σ'''	K_5	2

(D.4)

D.2.4 Untergruppen $UG \subseteq G$

Die Diedergruppe des Quadratgitters D_4 enthält 4 Untergruppen, wovon eine die Gruppe D_4 selber ist.

- $D_4 = \{K_1, K_3, K_2, K_4, K_5\}$
- $D_2 = \{K_1, K_3, K_4 \text{ oder } K_5\}$
- $C_4 = \{K_1, K_3, K_2\}$
- $C_2 = \{K_1, K_3\}$

Wird die Symmetrie des Quadratgitters beispielsweise durch periodische Randbedingungen (siehe nächster Abschnitt) gebrochen, so ist eine der D_4-Untergruppen nun die Symmetriegruppe des Quadratgitters mit den Randbedingungen.

Zusammen mit den Translationen des Quadratgitters findet man für das Quadratgitter alle Symmetrien der Ornamentgruppe p4m. Diese Gruppe enthält neben den D_4 Zentren noch Inversionszentren und diagonal durch diese verlaufende Gleitspiegelungen.

D.3 Endliche Ausschnitte und periodische Randbedingungen

In [74, 76] wurden der Einfluß der Randbedingungen für den Antiferromagneten auf endlichen Quadratgittern intensiv untersucht. Die Geometrie einiger dort benutzter Gitterzellen wird hier kurz beleuchtet. Zieht man für die Extrapolation endlicher Gitterzellen nur bipartite Gitterzellen mit quadratischer Form heran, so steht nur eine kleine Palette von Gitterzellen zur Verfügung. Dazu gehören Gitterzellen mit $N = 8$, 10, 16, 18, 20, 26, 32 und 36, die der diophantischen Gleichung $N = n^2 + m^2$ genügen. Systeme mit mehr als 36 Spins sind derzeit nicht oder nur mit extremen Aufwand zugänglich. Systeme mit $N \leq 16$ Spins zeigen topologische Eigenschaften, die diese Gitterzellen unbrauchbar werden lassen. Die Gitterzelle mit $N = 16$ Spins hat beispielsweise die gleiche Topologie wie eine hyperkubische $2 \times 2 \times 2 \times 2$-Zelle. In [74, 76] wurde gezeigt, daß auch nichtquadratische Gitterzellen für die Extrapolation geeignet sind. Die Auswahl an statistisch verwertbaren Datensätzen wächst durch Verwendung von Gitterzellen in Form von Parallelogrammen enorm. Bild D.3 zeigt neben vier üblichen Gitterzellen auf dem Quadratgitter drei neue Gitterzellen. Die Symmetrie dieser drei Zellen ist geringer als die der quadratischen Zellen. Die Form der Wigner-Seitz-Zellen ist durch gestrichene Linien hervorgehoben. Das Symmetriezentrum ist durch ein um 45° geneigtes Quadrat gekennzeichnet, neben dem die Punktsymmetriegruppe der Gitterzelle steht.

In Tabelle D.3 sind die in Bild D.3 dargestellten Gitterzellen einzeln aufgeführt. Daneben stehen die Punktsymmetrien des Quadratgitters in Schönfließ- und internationaler Notation. Erfüllen die Randbedingungen die entsprechende Symmetrie, so findet man ein Plus in der entsprechenden Spalte.

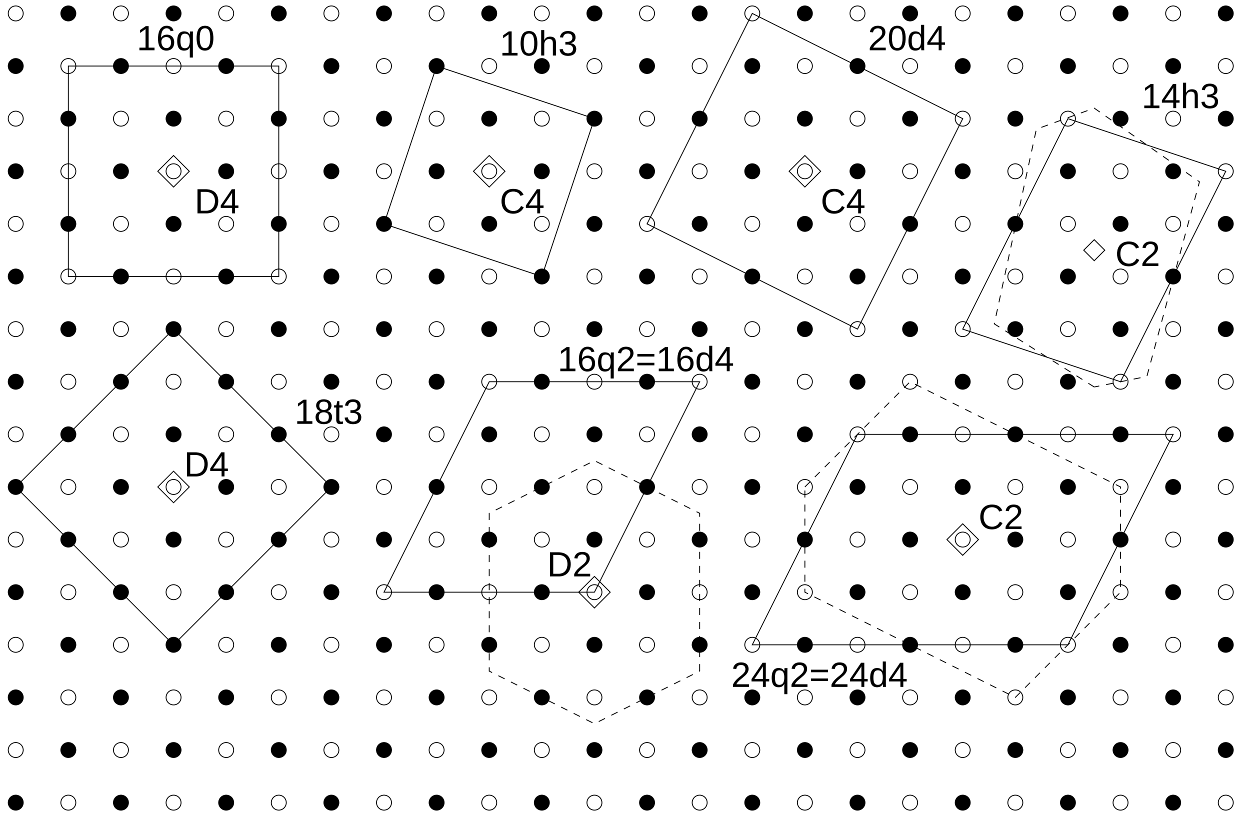


Abbildung D.2: Darstellung einiger endlicher, bipartiter Gitterzellen und, wenn von der Zellform abweichend, deren Wigner-Seitz-Form (gestrichelt). Daneben stehen die zugehörigen Punktsymmetriegruppen. Die Symmetriezentren sind hervorgehoben.

Tabelle D.3: Punktsymmetrien ausgewählter Gitterzellen auf dem Quadratgitter. Pluszeichen markieren Symmetrien der jeweiligen Gitterzellen.

Gitter	E	C_4	C_4^{-1}	C_2	σ	σ'	σ''	σ'''	UG
$16q0$	+	+	+	+	+	+	+	+	$D_4 - 4mm$
$10h3$	+	+	+	+					$C_4 - 4$
$20d4$	+	+	+	+					$C_4 - 4$
$14h3$	+			+					$C_2 - 2$
$18t3$	+	+	+	+	+	+	+	+	$D_4 - 4mm$
$16d4$	+			+			+	+	$D_2 - mm$
$24d4$	+			+					$C_2 - 2$

(D.5)

Anhang E

Darstellung endlicher Gitterzellen

Die in dieser Arbeit betrachteten Gitter besitzen Translationsinvarianz. Sie lassen sich damit durch periodisch angeordnete Parallelogramme (D=2) oder Parallelepipede (D=3) auf dem Gitter erzeugen. Für die exakte Diagonalisierung benötigt man endliche Systeme. Es ist also naheliegend, nur das im Parallelogramm[1] enthaltene Gitter zu betrachten. Randeffekte werden reduziert, indem man die gegenüberliegenden Seiten des Parallelogrammes aneinander klebt. Damit erhält man periodische Randbedingungen (PBC). In den folgenden Abschnitten werden die Konstruktion und Beschreibung endlicher Gitter am Beispiel des Quadratgitters und des Dreiecksgitters diskutiert.

E.1 Betts- und utlf-Notation

In diesem Anhang soll der Zusammenhang zwischen der Darstellung der Randbedingungen als utlf-Matrix und in Betts-Notation [74] veranschaulicht werden. Als Anschauungsbeispiel dient das bipartite Quadratgitter.

Gitterzellen können durch ihre Randvektoren

$$\mathbf{L}_i = \sum_{\beta=1}^{d} n_{i\beta}\mathbf{a}_\beta = \sum_{j=1}^{d} l_{ij}\mathbf{e}_j, \qquad n_{i\beta}, l_{ij} \in \mathcal{G}, \tag{E.1}$$

charakterisiert werden. Die Beschreibung der Randbedingungen durch die Gitterzellen beziehungsweise durch deren Randvektoren $\mathbf{L}_i$ ist jedoch nicht eindeutig, was eine systematische Generierung aller möglichen Gitterzellen erschwert. Betrachtet man als Beispiel eine Gitterzelle mit $N = 14$ auf einem bipartiten Quadratgitter Bild E.1, so kann man sich eine Gitterzelle als ein durch $\mathbf{L}_1$ und $\mathbf{L}_2$ aufgespanntes Parallelogramm, beschrieben durch die Matrix $L = (\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = ((1,3),(0,14))$ (utlf-Form), oder durch das gestrichelt dargestellte Parallelogramm, beschrieben durch die Matrix $L' = ((1,3),(-4,2))$ (mcf-Form), vorstellen. Beide Varianten definieren die gleichen Randbedingungen und beschreiben das gleiche physikalische System. Die Matrizen L und L' genügen dabei der Gleichung

$$L' T_i L^{-1} = U, \tag{E.2}$$

[1] Im folgenden spreche ich nur von D=2. Die meisten Aussagen können jedoch ohne weiteres auf beliebige Dimensionen D erweitert werden. Im Kapitel 2.2 zum BCC-Gitter findet der Leser näheres zum Fall D=3.

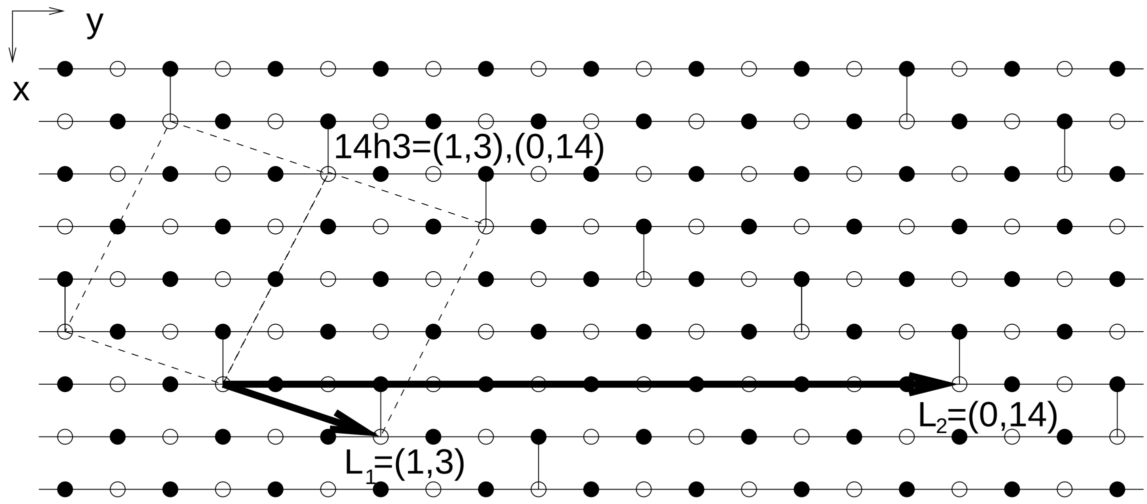


Abbildung E.1: Grafische Darstellung der Betts- und der utlf (upper triangular lattice form)-Notation für die Gitterzelle 14h3 mit $h \equiv 1$ (eine Windung der Länge 14) und einem Versatz von 3. Die utlf-Form kann als Mauerwerk von Rechtecken der Länge 14 und der Höhe 1 verstanden werden. Aufeinanderfolgende Schichten sind dabei um 3 versetzt. Beide Notationen sind äquivalent.

wobei im Beispiel die inverse Matrix $L^{-1} = ((14, -3), (0, 1))/14$ ist, U eine beliebige ganzzahlige Matrix darstellt (hier $U = ((1, 0), (-3, 1)))$ und T_i eine Punktsymmetrie des Quadratgitters ist (hier der einfachste Fall $T_i = ((1, 0), (0, 1)))$, für die $\mathrm{Det}(T_i) = \pm 1$ gilt (siehe Kapitel 2.2). Durch Linearkombination der Vektoren $\mathbf{L}_1$ und $\mathbf{L}_2$ kann man leicht weitere Parallelogramme konstruieren, die äquivalente Gitterzellen erzeugen und damit an der relevanten Physik nichts ändern.

Es ist daher naheliegend, bestimmte Formen vorzuziehen, um die Bezeichnung eindeutiger zu machen. Eine Möglichkeit ist die Wahl möglichst kurzer (kompakter) Vektoren, auch als *mcf* (**m**ost **c**ompact **f**orm) bezeichnet. Eine weitere Variante ist die *utlf* (**u**pper **t**riangular **l**attice **f**orm) nach [36]. Sie orientiert sich an der Darstellung der Randvektoren $\mathbf{L}_i$ in einer Matrix, bei der nur die Elemente im oberen rechten Dreieck von Null verschieden sind. Diese oder die transponierte Form wird oft auch als hermitische Normalform bezeichnet.

Die Bettsnotation [74] ist eine der utlf-Schreibweise nahe stehende jedoch kürzere Variante für zweidimensionale Gitter. Sie besteht aus einem Zahlentripel, bei dem die zweite Zahl durch einen Buchstaben abgekürzt wird. Dieses Zahlentripel beschreibt das Parallelogramm vollständig und kann gleichzeitig als Bezeichnung verwendet werden. Die erste Zahl steht für die Fläche des Parallelogramms oder die Anzahl der Spins auf dem Quadratgitter. Stellt man sich die gegenüberliegenden Seiten des Parallelogramms als miteinander verbunden vor, so entsteht ein Torus. Die auf der Waagerechten liegenden Gitterplätze bilden auf dem Torus eine Kette von Gitterplätzen, deren Ende mit dem Anfang der Kette verbunden ist. Liegen nicht alle Gitterplätze N auf einer Windung, so müssen mehrere Windungen nebeneinander gelegt werden. Das ist der Fall, wenn die Diagonalelemente der utlf-Matrix l_{11} und l_{22} ungleich 1 beziehungsweise N sind. Die Anzahl der Windungen l_{11} liefert dann die mittlere Zahl, für die ein Buchstabe (1=h, 2=d, 3=t, 4=q, 5=p, ...) eingesetzt wird. Nach l_{11} Windungen beginnt man wieder mit der ersten jedoch ver-

Tabelle E.1: Verschiedene utlf-Vektoren auf dem quadratischen Gitter für $N = 36$ Plätze. Neben den Randvektoren $((l_{11}, l_{12}), (l_{21}, l_{22}))$ in utlf-Form sind die Quadrate der Längen der drei kürzesten Randvektoren (l_i^2), die Symmetrie (Sym) der Gitterzellen in internationaler Notation, die Energie des Grundzustandes für den HAFM E_0 und dessen Quadrat der Magnetisierung m^2 (zwei wurden wegen des hohen Zeitaufwandes nicht berechnet) angegeben. Die Reihenfolge der Zahlenwerte für Magnetisierung und Energien hängt offensichtlich mit der Geometrie (Seitenlängen und Differenz der Seitenlängen) der durch die utlf-Vektoren aufgespannten Gitterzellen zusammen. Die Tabelle ist nach absteigenden Energien geordnet.

N	l_{11}	l_{12}	l_{21}	l_{22}	l_1^2	l_2^2	l_3^2	Sym	E_0	m^2
36	3	5	0	12	36	37	45	p2	-24.42883226	0.21071424
36	2	6	0	18	36	40	52	p2	-24.43188298	0.21046702
36	6	0	0	6	36	36	72	p4m	-24.43939739	0.20983715
36	1	5	0	36	26	50	72	p2	-24.46101129	
36	2	4	0	18	20	36	68	p2	-24.50944370	
36	1	11	0	36	18	61	73	p2	-24.53020286	0.20254717
36	3	3	0	12	18	72	90	pmm	-24.53020288	0.20256654
36	1	9	0	36	16	82	90	p2	-24.67562064	0.19035164
36	1	3	0	36	10	130	136	p2	-24.97033390	0.17897370
36	2	2	0	18	8	40	41	pmm	-25.24231197	0.15308396

setzten Windung. Der Versatz liefert die dritte Zahl des Tripels und ist identisch mit l_{12} der utlf-Matrix. Abbildung E.1 zeigt ein entsprechendes Beispiel mit $N = 14$ Gitterplätzen, einer Windung und einem Versatz von drei.

E.2 Ungünstige Randbedingungen

Das in Bild E.1 dargestellte Beispiel wird hier verwendet, um zu zeigen, wie sich die Randbedingungen auf die Finite-Size-Extrapolation auswirken können. Neben der trivialen Forderung, daß die Randbedingungen zum klassischen Grundzustand passen müssen, kann man weitere Eigenschaften der durch die Randbedingungen definierten Gitterzellen finden, die die Extrapolation zum thermodynamischen Limes beeinflußt. Alle Gitterzellen, die sich zum Beispiel durch die Betts-Notation [74] Nh3 (N beliebig, im Beispiel Bild E.1 ist $N = 14$) definiert werden, haben den gleichen Randvektor $\mathbf{L}_1 = (1, 3)$, nur die Länge des Randvektors $\mathbf{L}_2 = (0, N)$ ändert sich mit der Systemgröße N. Wegen der periodischen Randbedingungen koppelt jeder Spin in x-Richtung mit dem in $(-y)$-Richtung drei Gitterplätze entfernten Nachbarn. Damit ist die Gitterzelle Nh3 identisch zu einer endlichen Kette der Länge N mit nächster (J_1) und drittnächster (J_3) Nachbar-Wechselwirkung und periodischen Randbedingungen. Folglich skalieren die Gitterzellen Nh3 genauso wie die J_1-J_3-Kette und nicht wie das Quadratgitter. In einem $E(1/N)$-Diagramm (Abbildung 4.10 in Kapitel 4), das alle möglichen Gitterzellen enthält, fallen die Gitterzellen Nh3 auf, da sie auf einer Kurve liegen und von der Masse der anderen Punkte zu tieferen Energien hin abweichen. Eine andere Klasse von Gitterzellen ist die der Nd2-Gitterzellen.

Sie sind identisch zur Spin-1-Kette, wobei jeweils zwei Spins ($s = 1/2$) mit ihren zwei nächsten Nachbarn koppeln und letztendlich einen neuen effektiven Spin-1 bilden. Es ist leicht vorstellbar, daß sich jede beliebige Gitterzelle in einer Reihe eindimensionaler Zellen (definiert durch $L = ((n_1, n_2), (0, N/n_1)))$ mit einem gemeinsamen Randvektor $\mathbf{L}_2 = (0, N/n_1)$ fortsetzen läßt. Die Grundzustandsenergie dieser Reihen skalieren dann jedoch wie eindimensionale Systeme mit $1/N^2$ und nicht wie zweidimensionale Systeme mit $1/N^{3/2}$ und haben damit niedrigere Energien als die Zellen mit „günstigen" Randbedingungen. Dieser Argumentation folgend, sollten Systeme, die höhere Grundzustandsenergien liefern (siehe Tabelle E.1), tendentiell bessere Extrapolationen liefern als die sonst übliche Nutzung symmetrischer Systeme. Die Überprüfung dieser Vermutung ist jedoch schwierig, da man gerade für zweidimensionale HAFM keine exakten Ergebnisse für $N = \infty$ kennt.

E.3 Endliche Dreiecksgitter

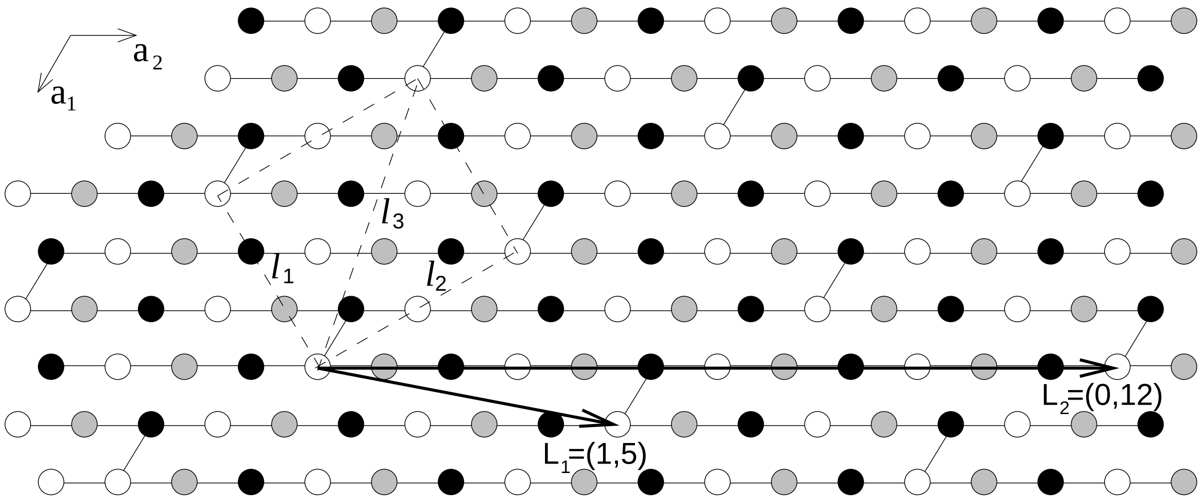


Abbildung E.2: Grafische Darstellung der Betts- und utlf-Notation für endliche Gitterzellen auf dem Dreiecksgitter.

Die Gitterzellen auf dem Dreiecksgitter (auch den anderen Gittern mit hexagonaler Symmetrie) können wie auf dem Quadratgitter durch die utlf-Schreibweise (Abschnitt E.1) definiert werden. Die Basis für die utlf-Vektoren bilden dabei zwei um $2\pi/3$ oder um $\pi/3$ gegeneinander gedrehte Gittervektoren. Die Notation ist deshalb ohne Angabe der Basis ($\mathbf{a}_1$ und $\mathbf{a}_2$ in Bild E.2) nicht eindeutig. Eine bessere Notation ist die Angabe eines Zahlentripels (l_1^2, l_2^2, l_3^2) mit $l_1 \leq l_2 \leq l_3$, wobei l_i die drei kürzesten Entfernungen zwischen 3 Eckvektoren sind[2], die durch Liniearkombinationen der utlf-Vektoren erzeugt werden. Solch ein Zahlentripel ist eine eindeutige Beschreibung der Gitterzelle auf einem Dreiecksgitter. In Abbildung E.2 sind die utlf-Vektoren $\mathbf{L}_1$ und $\mathbf{L}_2$ für eine Gitterzelle $L = ((1, 5), (0, 12))$ mit $N = 12$ Spins dargestellt[3]. Für dieses Beispiel ist

[2] Diese Idee stammt aus einem Vortrag von D.D. Betts, der sich erstmalig mit der Systematik „schiefer" Gitterzellen beschäftigte.

[3] In der alternativen Basis zweier gegeneinander um $\pi/3$ gedrehter Einheitsvektoren würde die selbe Gitterzelle durch $L = ((1, 4), (0, 12))$ definiert werden.

Tabelle E.2: Verschiedene utlf-Vektoren auf dem Dreiecksgitter für $N = 36$ Plätze. Neben den Randvektoren $((l_{11}, l_{12}), (l_{21}, l_{22}))$ in utlf-Form sind die Quadrate der Längen der drei kürzesten Randvektoren (l_i^2), die Symmetrie (Sym) der Gitterzellen (internationale Bezeichnung), die Energie des Grundzustandes für den HAFM E_0 und dessen Quadrat der Magnetisierung m^2 (zwei wurden wegen des hohen Zeitaufwandes nicht berechnet) angegeben. Die Tabelle ist nach absteigenden Energien geordnet.

N	l_{11}	l_{12}	l_{21}	l_{22}	l_1^2	l_2^2	l_3^2	Sym	E_0	$(m^+)^2$
36	6	0	0	6	36	36	36	p6m	-20.1734422	0.12480193
36	1	5	0	36	21	48	57	p2	-20.2098992	
36	6	3	0	6	27	36	63	pmm	-20.2164099	0.12110900
36	2	7	0	18	27	39	48	p2	-20.2278079	
36	3	3	0	12	9	108	117	pmm	-20.5769984	0.10894301
36	2	4	0	18	12	84	84	pmm	-21.0500664	0.08362726

das von der Wahl der Basis unabhängige Zahlentripel (l_1^2, l_2^2, l_3^2)=(9,12,21). Tabelle E.2 zeigt die Energie und Magnetisierung endlicher Gitterzellen mit $N = 36$ mit verschiedenen utlf-Vektoren. Ebenfalls aufgeführt sind die Zahlentripel (l_1^2, l_2^2, l_3^2) und die Symmetrie der Gitterzellen. In den Abbildungen zu Extrapolationen (Kapitel 4) werden Gitterzellen mit „ungünstigen" Randbedingungen (siehe Abschnitt E.2) durch Angabe der kleinsten Zahl $l^2 = l_1^2$ aus dem Zahlentripel gekennzeichnet.

Anhang F

Der Heisenberg-Antiferromagnet auf dem BCC-Gitter

F.1 Geometrische und topologische Gleichheit

Wie bereits im Kapitel zum BCC-Gitter erwähnt, ist die Beschreibung der Randbedingungen durch die in Matrixform L gebrachten Randvektoren nicht eindeutig. Beispielsweise beschreiben L_1 und L_2 die gleichen Randbedingungen, wenn das Produkt

$$L_1 \cdot L_2^{-1} = U \tag{F.1}$$

eine ganzzahlige Matrix mit $\mathrm{Det}(U) = 1$ wird.

In diesem Abschnitt sollen einige Beispiele für das quadratische Gitter gegeben werden. Damit sollen einige Begriffe für den Leser anschaulicher gemacht werden. Die Basisvektoren für das quadratische Gitter sind mit $\mathbf{a}_1 = (1,0)$ und $\mathbf{a}_2 = (0,1)$ identisch mit den Basisvektoren des kartesischen Koordinatensystems. Zunächst soll ein Paar von Randvektoren für ein 12-Spin-System gewählt werden. Mit den Vektoren $\mathbf{L}_1^{mcf} = (4,-2)$ und $\mathbf{L}_2^{mcf} = (2,2)$ soll der Rand für ein Gitterausschnitt definiert werden, der in Matrixform

$$L^{mcf} = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \tag{F.2}$$

geschrieben wird. Dieselben Randbedingungen können auch durch andere Vektoren $\mathbf{L}_1^{utlf} = (2,2)$ und $\mathbf{L}_2^{utlf} = (0,6)$ beschrieben werden. Diese sind Linearkombinationen der alten Vektoren $\mathbf{L}_i^{mcf}$ mit $U^{-1}L^{mcf} = L^{utlf}$ und erfüllen damit automatisch Gleichung F.1.

$$L^{mcf} \cdot (L^{utlf})^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = U \tag{F.3}$$

Auf diese Weise können Randbedingungen immer in die obere Dreiecksform (utlf) gebracht werden. Diese ist jedoch nicht immer eindeutig. So können die Randbedingungen wegen der

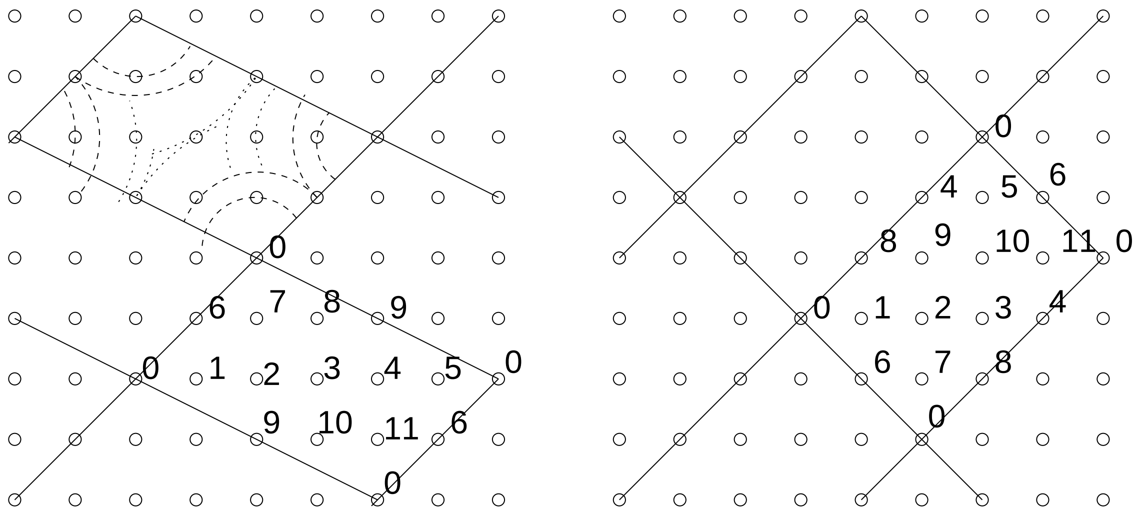


Abbildung F.1: Zwei geometrisch verschieden gewählte Randbedingungen können zu völlig gleichen Eigenfunktionen des Hamiltonoperators führen. Als Beispiel werden hier zwei Gitterzellen (Linien) auf dem quadratischen Gitter (Punkte) gezeigt. Trotz der geometrischen Unterschiede sind die Hamiltonoperatoren für diese Fälle identisch wenn nur nächste Nachbarn wechselwirken. Enthält der Hamiltonoperator auch übernächste Wechselwirkungen (diagonal), so sind beide Fälle auch topologisch verschieden. Links oben werden die geometrischen Verhältnisse genauer dargestellt. Auf Grund der periodischen Randbedingungen überlappen sich Kreise mit einem Radius größer $\sqrt{2}$. Das führt dazu, daß diese Zelle nur drei statt vier übernächste Nachbarn besitzt.

Symmetrien des Quadratgitters auch durch die Dreiecksmatrix $L' = ((2,4),(0,6))$ dargestellt werden. Dann wird

$$L'^{utlf} \cdot T \cdot (L^{utlf})^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} = U \tag{F.4}$$

eine ganzzahlige Matrix wobei T eine $\pi/2$-Drehung darstellt. Beide Dreiecksmatrizen beschreiben die gleichen Randbedingungen. Da diese Gleichheit aufgrund geometrischer Eigenschaften des Gitters besteht, ist sie geometrischer Art.

Da die in dieser Arbeit benutzten Hamiltonoperatoren keine geometrischen Koordinaten enthalten, ist eigentlich nur Ihre Topologie von Bedeutung. Es kommt vor, daß zwei geometrisch verschiedene Gitterzellen die gleiche Topologie besitzen und damit durch den gleichen Hamiltonoperator beschrieben werden. Das kann anschaulicher gemacht werden, wenn man den Hamiltonoperator als Graphen darstellt. Die Knoten des Graphen sind dann die Plätze an denen die Spins sitzen. Die Kanten sind die Wechselwirkungen zwischen den Plätzen. Graphen können in Matrixform dargestellt werden. Diese Matrix heißt Adjaszenzmatrix oder Nachbarschaftsmatrix. Für ein N-Platzsystem hat die Matrix N Zeilen und N Spalten. Ein Matrixelement in Zeile i und Spalte j ist ungleich Null, wenn der Graph eine Kante zwischen den Knoten i und j besitzt, was der Fall ist, wenn im Heisenbergoperator eine Wechselwirkung $J_{ij} = J$ zwischen den Plätzen

i und j besteht. Die Adjaszenzmatrix für Bild F.1 (links) ist beispielsweise

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{F.5}$$

Die rechte Gitterzelle hat zwar eine andere Geometrie aber die selbe Adjaszenzmatrix und ist damit topologisch gleich. Im allgemeinen werden die Plätze eine andere Numerierung besitzen. Dann sind die Zeilen und Spalten der Adjaszenzmatrix A permutiert und es muß eine Permutationsmatrix P gefunden werden, die die Rücktransformation $P^{-1}A'P$ ermöglicht. Diese Permutation zu finden ist ein nichttriviales Problem (nicht polynomial) und seit längerem als GIP (graph isomorphism problem) bekannt. Für die in der Arbeit auftretenden Systemgrößen ($N \leq 36$) läßt sich die Isomorphie von Graphen und damit die topologische Gleichheit von Gitterzellen noch relativ leicht testen.

F.2 Geometrische und topologische Imperfektion

Ein einfacher Parameter, der die durch periodische Randbedingungen erzeugten Gitterfehler erfaßt, ist die geometrische oder topologische Imperfektion (I_g b.z.w. I_t). In diesem Abschnitt soll dem weniger vertrauten Leser ein Beispiel erklärt werden. Wie schon vorher soll dies am Beispiel des quadratischen Gitters geschehen. Die Imperfektion ist eine einfache Zahl, die es ermöglicht, Randbedingungen nach ihrer Eignung für Finite-Size-Extrapolationen zu sortieren. Sie ist Null, wenn die Nachbarschaftsverhältnisse dem des unendlich ausgedehnten Gitters entsprechen und wird größer, wenn die Nachbarschaftsverhältnisse von denen des unendlich ausgedehnten Gitters abweichen.

Bild F.1 (links) zeigt oben links den Rand einer Gitterzelle auf dem quadratischen Gitter. Um den Platz 0 sind Kreisbögen vom Radius R gleich 1, $\sqrt{2}$, 2 und $\sqrt{5}$ geschlagen. Man erkennt, daß dieser Platz vier nächste Nachbarn (1, 7, 5, 11) hat. Im Gegensatz zum Quadratgitter mit vier übernächsten Nachbarn ($R = \sqrt{2}$) hat die endliche Gitterzelle nur drei übernächste Nachbarn (6, 8, 10). Der fehlende vierte übernächste Nachbar erhöht die geometrische Imperfektion um eins, b.z.w. um $1/N$, wenn die Imperfektion pro Platz definiert wird. Statt 4 Nachbarn mit $R = 2$ finden sich in Bild F.1 nur zwei Plätze (2, 4) und im Abstand $R = \sqrt{5}$ finden sich die letzten zwei Plätze (3, 9). Diese fehlen im Abstand $R = 2$, was die Imperfektion um weitere zwei Punkte erhöht. Somit ist die geometrische Imperfektion $I_g = 3$. Die Berechnung der topologischen Imperfektion erfolgt ähnlich. Nur wird als Abstandsfunktion nicht der geometrische, sondern der

Tabelle F.1: Randvektoren der topologisch verschiedenen bipartiten BCC-Gitterzellen mit bis zu 32 Gitterplätzen in Dreiecksform (utlf) und Kompaktform (mcf). (Fortsetzung in Tabelle F.2)

Nα	utlf-Vektoren			mcf-Vektoren		
	$\mathbf{L}_1$	$\mathbf{L}_2$	$\mathbf{L}_3$	$\mathbf{l}_1$	$\mathbf{l}_2$	$\mathbf{l}_3$
16A	(4,0, 0)	(0,4, 0)	(0,0, 4)	(4, 0, 0)	(0, 4, 0)	(0, 0, 4)
18A	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,18)	(2,-4, 0)	(0, 2, 4)	(-4, 0, 2)
20B	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,20)	(2,-4, 0)	(0, 2, 4)	(-4,-2, 0)
20A	(2,0,10)	(0,2, 6)	(0,0,20)	(-2, 4, 2)	(-2,-2, 4)	(4, 0, 0)
22A	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,22)	(-4,-2, 2)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
24D	(2,0, 4)	(0,4, 6)	(0,0,12)	(-2, 4, 2)	(-2,-4, 2)	(2, 0, 4)
24C	(2,0,10)	(0,2, 6)	(0,0,24)	(2,-2, 4)	(-2, 4, 2)	(-4,-2,-2)
24B	(2,0,10)	(0,2, 4)	(0,0,24)	(-2, 4,-2)	(0, 2, 4)	(4, 2, 0)
24A	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,24)	(-4,-4, 0)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
24E	(2,0,12)	(0,2, 4)	(0,0,24)	(-2, 4,-4)	(0,-2,-4)	(-4, 0, 0)
24F	(2,0,12)	(0,2, 6)	(0,0,24)	(0, 2, 6)	(-2, 4, 0)	(-4, 0, 0)
26A	(2,0,10)	(0,2, 4)	(0,0,26)	(2,-4, 2)	(-4,-2, 2)	(0,-2,-4)
26B	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,26)	(-4,-4, 2)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
28D	(2,0,10)	(0,2, 6)	(0,0,28)	(2,-2, 4)	(-2, 4, 2)	(-4,-2, 2)
28C	(2,0,10)	(0,2, 4)	(0,0,28)	(-4,-4, 0)	(-2, 4,-2)	(0,-2,-4)
28A	(2,0,12)	(0,2, 8)	(0,0,28)	(4, 0,-4)	(-2, 2,-4)	(2, 4, 0)
28B	(2,0,12)	(0,2, 4)	(0,0,28)	(-2, 4,-4)	(0, 2, 4)	(4, 2, 0)
28E	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,28)	(-6,-2, 0)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
28F	(2,0,14)	(0,2, 4)	(0,0,28)	(2, 6,-2)	(0,-2,-4)	(-4, 0, 0)

topologische Abstand (engl.: Manhattan distance) benutzt. Ungünstige Randbedingungen, z.B. mit sehr kurzen Randabstand führen ganz automatisch zu großen Werten für die Imperfektion und können so klassifiziert werden. Die bei Extrapolationen auf dem Quadratgitter üblichen Gitterzellen $N = 4\times 4, \sqrt{20}\times\sqrt{20}, \sqrt{26}\times\sqrt{26}, \ldots$ haben sehr kleine Imperfektionen und gehören damit zu den Randbedingungen, die für Extrapolationen geeignete Werte liefern.

F.3 Grundzustand endlicher BCC-Gitterzellen

Im den folgenden Tabellen werden die Randvektoren und Resultate der exakten Diagonalisierung präsentiert. Γ_1 ist die gemittelte Spinkorrelation $\langle \mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+\mathbf{R}}\rangle$ zwischen nächsten Nachbarn (Abstand $|\mathbf{R}| = \sqrt{3}$). Γ_2 ist die gemittelte Spinkorrelation für übernächste Nachbarn (Abstand $|\mathbf{R}| = 2$) und Γ_3 ist die gemittelte Spinkorrelation für drittnächste Nachbarn (Abstand $|\mathbf{R}| = \sqrt{8}$). Γ_1 ist bis auf den Faktor 4 identisch mit der Grundzustandsenergie $\epsilon_0 = 4\Gamma_1$. m^+ ist die Untergittermagnetisierung pro Spin $m^+ = \left[\langle(\mathbf{M}^+)^2\rangle\right]^{1/2}/N$ mit $\langle(\mathbf{M}^+)^2\rangle = \sum_{i,j=1}^{N} |\langle\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j\rangle|$. Ebenfalls angegeben ist das aus der Extrapolation der Energie ermittelte statistische Gewicht w_1.

Tabelle F.2: Randvektoren der topologisch verschiedenen bipartiten BCC-Gitterzellen mit bis zu 32 Gitterplätzen. (Fortsetzung von Tabelle F.1)

Nα	utlf-Vektoren			mcf-Vektoren		
	$\mathbf{L}_1$	$\mathbf{L}_2$	$\mathbf{L}_3$	$\mathbf{l}_1$	$\mathbf{l}_2$	$\mathbf{l}_3$
30F	(2,0,10)	(0,2, 6)	(0,0,30)	(-4,-4,-2)	(-2, 4, 2)	(-2, 2,-4)
30E	(2,0,10)	(0,2, 4)	(0,0,30)	(-6, 0, 0)	(-2, 4,-2)	(0,-2,-4)
30C	(2,0,12)	(0,2, 6)	(0,0,30)	(0,-2,-6)	(-4,-2, 0)	(-2, 4, 0)
30B	(2,0, 4)	(0,6, 0)	(0,0,10)	(0,-6, 0)	(-4, 0, 2)	(-2, 0,-4)
30A	(2,0,12)	(0,2, 4)	(0,0,30)	(-2, 4,-4)	(4, 2,-2)	(0,-2,-4)
30D	(2,0,12)	(0,2, 8)	(0,0,30)	(2,-4,-4)	(-4,-2,-2)	(-2, 2,-4)
30G	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,30)	(-6,-2, 2)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
32K	(2,0, 6)	(0,4, 4)	(0,0,16)	(0, 4, 4)	(-4, 0, 4)	(2,-4, 2)
32J	(4,0, 4)	(0,4, 4)	(0,0, 8)	(4, 0, 4)	(0, 4, 4)	(-4,-4, 0)
32H	(2,0,10)	(0,2, 6)	(0,0,32)	(-4,-4, 0)	(-2, 4, 2)	(-2, 2,-4)
32G	(2,0,12)	(0,2, 4)	(0,0,32)	(-2, 4,-4)	(4, 4, 0)	(0,-2,-4)
32F	(2,0, 6)	(0,4, 8)	(0,0,16)	(2, 0, 6)	(2, 4,-2)	(-2, 4, 2)
32E	(2,0,10)	(0,2, 4)	(0,0,32)	(-6, 0, 2)	(-2, 4,-2)	(0,-2,-4)
32A	(2,0,14)	(0,2, 8)	(0,0,32)	(-4,-2,-4)	(-2,-4, 2)	(-2, 4, 2)
32B	(2,2, 6)	(0,4, 0)	(0,0,16)	(-2,-2,-6)	(4, 0,-4)	(0,-4, 0)
32C	(2,0, 4)	(0,4, 8)	(0,0,16)	(-4, 4, 0)	(-4,-4, 0)	(2, 0, 4)
32D	(2,2, 4)	(0,8, 0)	(0,0, 8)	(4,-4, 0)	(-2,-2, 4)	(-2,-2,-4)
32I	(2,0,12)	(0,2, 8)	(0,0,32)	(2,-4,-4)	(-2, 2,-4)	(4, 2, 0)
32L	(2,4, 4)	(0,8, 0)	(0,0, 8)	(-2, 4,-4)	(-2, 4, 4)	(4, 0, 0)
32M	(2,0,14)	(0,2, 4)	(0,0,32)	(-2, 6,-2)	(0, 2, 4)	(4, 2, 0)
32N	(2,0, 4)	(0,4, 4)	(0,0,16)	(-4,-4, 4)	(-2, 4, 0)	(-2, 0,-4)
32P	(2,0, 8)	(0,2, 4)	(0,0,32)	(-6,-4, 0)	(0, 2, 4)	(-2, 4, 0)
32Q	(2,0,16)	(0,2, 4)	(0,0,32)	(2, 6,-4)	(0,-2,-4)	(-4, 0, 0)

Tabelle F.3: Die Tabelle zeigt die berechnete Magnetisierung pro Spin m^+, und die Spin-Spin-Korrelationen zwischen nächsten, übernächsten und drittnächsten Nachbarn Γ_1, Γ_2 und Γ_3, das statistische Gewicht w_1, von Γ_1 (b.z.w. der Grundzustandsenergie $4\Gamma_1$) des S=1/2-HAFM für alle topologisch verschiedenen endlichen BCC-Gitterzellen mit $N \leq 32$ Plätzen. (Fortsetzung in Tabelle F.4)

Nα	m^+	Γ_1	w_1	Γ_2	Γ_3
16A	0.559 0170	-0.312 500	0.996	0.250 000	—
18A	0.549 6565	-0.309 415	0.999	0.246 137	-0.243 779
20A	0.541 8660	-0.306 983	0.998	0.242 910	-0.240 163
20B	0.541 9474	-0.306 949	0.991	0.243 008	-0.240 741
22A	0.535 3653	-0.304 979	0.994	0.240 278	-0.237 650
24A	0.529 5492	-0.303 416	0.998	0.237 729	-0.234 435
24B	0.529 8510	-0.303 301	0.986	0.238 082	-0.235 625
24C	0.529 3639	-0.303 490	0.981	0.237 520	-0.237 700
24D	0.529 9500	-0.303 263	0.971	0.238 197	-0.236 017
24E	0.529 9674	-0.303 259	0.969	0.238 217	-0.236 080
24F	0.528 5647	-0.303 799	0.706	0.236 597	-0.230 544
26A	0.525 1659	-0.301 860	0.964	0.236 282	-0.234 103
26B	0.524 2474	-0.302 191	0.931	0.235 239	-0.231 066
28A	0.520 7211	-0.300 755	0.993	0.234 316	-0.231 678
28B	0.520 0785	-0.300 975	0.952	0.233 596	-0.229 824
28C	0.521 1685	-0.300 593	0.910	0.234 819	-0.232 982
28D	0.521 2568	-0.300 557	0.879	0.234 179	-0.233 244
28E	0.519 3081	-0.301 240	0.688	0.232 733	-0.227 603
28F	0.518 9486	-0.301 366	0.508	0.232 332	-0.226 563

Tabelle F.4: Die Tabelle zeigt die berechnete Magnetisierung pro Spin m^+, und die Spin-Spin-Korrelationen zwischen nächsten, übernächsten und drittnächsten Nachbarn Γ_1, Γ_2 und Γ_3, das statistische Gewicht w_1, von Γ_1 (b.z.w. der Grundzustandsenergie $4\Gamma_1$) des S=1/2-HAFM für alle topologisch verschiedenen endlichen BCC-Gitterzellen mit $N \leq 32$ Plätzen. (Fortsetzung von Tabelle F.3)

Nα	m^+	Γ_1	w_1	Γ_2	Γ_3
30A	0.516 8641	-0.299 770	0.999	0.232 659	-0.229 789
30B	0.516 9294	-0.299 758	0.997	0.232 731	-0.230 024
30C	0.516 9302	-0.299 758	0.997	0.232 732	-0.230 028
30D	0.516 3136	-0.299 952	0.954	0.232 050	-0.228 439
30E	0.517 3857	-0.299 593	0.925	0.233 237	-0.231 225
30F	0.517 7871	-0.299 441	0.779	0.233 683	-0.232 289
30G	0.514 6583	-0.300 501	0.281	0.230 221	-0.224 155
32A	0.513 6234	-0.298 855	0.995	0.231 396	-0.228 763
32B	0.513 4834	-0.298 917	1.000	0.231 243	-0.228 414
32C	0.513 4433	-0.298 928	0.999	0.232 340	-0.228 320
32D	0.513 4277	-0.298 930	0.999	0.232 325	-0.228 286
32E	0.513 7568	-0.298 812	0.983	0.231 542	-0.229 141
32F	0.513 8191	-0.298 780	0.969	0.231 611	-0.229 962
32G	0.514 1207	-0.298 684	0.908	0.231 941	-0.229 957
32H	0.514 1236	-0.298 684	0.908	0.231 945	-0.229 962
32I	0.512 8576	-0.299 116	0.920	0.231 739	-0.226 930
32J	0.514 3656	-0.298 600	0.829	0.232 778	-0.226 091
32K	0.514 5824	-0.298 521	0.737	0.231 709	-0.229 962
32L	0.512 5163	-0.299 255	0.786	0.230 104	-0.219 460
32M	0.511 6581	-0.299 480	0.479	0.229 246	-0.224 108
32N	0.511 5721	-0.299 515	0.426	0.230 421	-0.223 898
32P	0.510 2774	-0.299 915	0.002	0.229 101	-0.220 851
32Q	0.509 6882	-0.300 104	0.000	0.233 290	-0.230 544

Anhang G

Störungstheorie für die Dimer-Plaketten-Kette

G.1 Operator-Störungstheorie

Gesucht werden der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ und dessen Energie E_0 des gestörten Operators $H = H_0 + V$. Sie erfüllen die Eigenwertgleichung

$$(H_0 + V)|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle. \tag{G.1}$$

Dabei werden die Eigenfunktionen $|\phi_\mu\rangle$ und Eigenwerte W_μ des ungestörten Operators H_0 als bekannt vorausgesetzt.

$$H_0|\phi_\mu\rangle = W_\mu|\phi_\mu\rangle \tag{G.2}$$

Der Grundzustand von H_0 ist $|\phi_0\rangle$ mit dem Erwartungswert W_0. Mit den Normierungsbedingungen $\langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1$ und $\langle\psi_0|\phi_0\rangle = 1$ (i.a. $\langle\psi_0|\psi_0\rangle \neq 1$) gelten dann folgende Gleichungen

$$\begin{aligned} E_0 &= W_0 + \langle\phi_0|V|\psi_0\rangle && \text{(G.3)} \\ |\psi_0\rangle &= |\phi_0\rangle + R_s(V - E_0 + W_0)|\psi_0\rangle \\ &= |\phi_0\rangle + R_s(V - \langle\phi_0|V|\psi_0\rangle)|\psi_0\rangle && \text{(G.4)} \end{aligned}$$

mit der Abkürzung

$$R_s = QP = \frac{1}{W_0 - H_0}P.$$

Das ist die *Rayleigh-Schrödinger-Darstellung.*

P ist ein Projektionsoperator auf Anregungen von H_0

$$P = 1 - P_0 = {\sum_\mu}' P_\mu = \sum_{\mu\neq 0} P_\mu, \qquad P_0 = |\phi_0\rangle\langle\phi_0|, \qquad P_i^2 = P_i.$$

Die gestrichene Summe wird über $\mu \neq 0$ ausgeführt. P_0 ist Projektionsoperator auf den Grundzustand von H_0. Für entartete Grundzustände benutzt man entsprechende Summen

$$P_0 = \sum_i^{EA} |\phi_{0i}\rangle\langle\phi_{0i}|.$$

Mit den Eigenwerten und Eigenfunktionen von H_0 findet man für R_s

$$R_s = \sum_{\mu}{}' \frac{1}{W_0 - W_\mu} |\phi_\mu\rangle\langle\phi_\mu|.$$

Man entwickelt die Eigenzustände und Energien durch rekursives Anwenden der Gleichungen G.4 und G.3.

Die niedrigsten vier Korrekturen in V sind in folgenden Gleichungen aufgeführt. Der obere Index bezeichnet die Ordnung der Störung.
0. Ordnung:

$$E_0^0 = W_0, \qquad |\psi_0\rangle^0 = |\phi_0\rangle \tag{G.5}$$

1. Ordnung: Einsetzen von $|\psi_0\rangle^0$ in (G.4) und (G.3) und E_0^0 in (G.4) liefert mit $R_s|\phi_0\rangle = P|\phi_0\rangle = 0$ und der Abkürzung $\langle\ldots\rangle = \langle\phi_0|\ldots|\phi_0\rangle$ die Korrekturen in erster Ordnung.

$$\begin{aligned} E_0^1 &= E_0^0 + \langle V\rangle && \text{(G.6)} \\ |\psi_0\rangle^1 &= |\phi_0\rangle + R_s V|\phi_0\rangle \end{aligned}$$

2. Ordnung: Einsetzen von $|\psi_0\rangle^1$ in (G.4) und (G.3), E_0^1 in (G.4).

$$\begin{aligned} E_0^2 &= E_0^1 + \langle V R_s V\rangle && \text{(G.7)} \\ |\psi_0\rangle^2 &= |\phi_0\rangle + R_s(V - E_0^1 + W_0)|\psi_0^1\rangle \\ &= |\phi_0\rangle + R_s V|\phi_0\rangle + R_s(V - \langle V\rangle)R_s V|\phi_0\rangle \end{aligned}$$

3. Ordnung: Einsetzen von $|\psi_0\rangle^2$ in (G.4) und (G.3), E_0^2 in (G.4).

$$\begin{aligned} E_0^3 &= E_0^2 + \langle V R_s V R_s V\rangle - \langle V R_s^2 V\rangle\langle V\rangle && \text{(G.8)} \\ |\psi_0\rangle^3 &= |\phi_0\rangle + R_s(V - E_0^2 + W_0)|\psi_0\rangle^2 \\ &= |\phi_0\rangle + R_s V|\phi_0\rangle + R_s(V - \langle V\rangle)R_s V|\phi_0\rangle \\ &\quad + R_s(V - \langle V\rangle)R_s(V - \langle V\rangle)R_s V|\phi_0\rangle - R_s\langle V R_s V\rangle R_s V|\phi_0\rangle - \\ &\quad \underbrace{R_s\langle V R_s V\rangle R_s(V - \langle V\rangle)R_s V|\phi_0\rangle}_{\text{4. Ordnung}} \end{aligned}$$

4. Ordnung:

$$\begin{aligned} E_0^4 &= E_0^3 + \langle V R_s^3 V\rangle(\langle V\rangle)^2 - 2\langle V R_s V R_s^2 V\rangle\langle V\rangle \\ &\quad + \langle V R_s V R_s V R_s V\rangle - \langle V R_s^2 V\rangle\langle V R_s V\rangle && \text{(G.9)} \end{aligned}$$

Der effektive Hamiltonoperator wird über folgende Gleichungen

$$H_{eff}^{(n)}|\phi_0\rangle = E_0^{(n)}|\phi_0\rangle, \qquad H_{eff}^{(n)} = P_0 \hat{O}_n P_0, \qquad E_0^{(n)} = \langle\phi_0|\hat{O}_n|\phi_0\rangle$$

definiert. Verschwinden die Störungen bis dritter Ordnung, so enthält der Störungsterm vierter Ordnung nur noch einen Term, der sich nach

$$H_{eff}^{(4)} = \sum_{\mu\nu\epsilon}{}' \frac{P_0 V P_\mu V P_\nu V P_\epsilon V P_0}{(W_0 - W_\mu)(W_0 - W_\nu)(W_0 - W_\epsilon)} \tag{G.10}$$

berechnen läßt.

G.2 Entwicklung um J_p für $J_d < 0$

Der Grundzustand des ungestörten Operators für die Dimer-Plaketten-Kette $H_0 = H_{d-p}(J_p = 0) = J_d \sum_{n=1}^{N_p} \mathbf{S}_\alpha^n \mathbf{S}_\beta^n$ für ferromagnetische Dimerkopplung $J_d < 0$ ist

$$|\phi_0\rangle = \prod_{i=1}^{N_p} |\tau_i^{\pm,0} t_i^{\pm,0}\rangle. \tag{G.11}$$

Die Energie dieses Zustandes ist $W_0 = N_p J_d/4$ und $\tau_i^{\pm,0}$ bezeichnet eines der Tripletts

$$\tau_i^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{i\alpha}\downarrow_{i\beta} + \downarrow_{i\alpha}\uparrow_{i\beta}), \qquad \tau_i^+ = \uparrow_{i\alpha}\uparrow_{i\beta} \quad \text{oder} \quad \tau_i^- = \downarrow_{i\alpha}\downarrow_{i\beta} \tag{G.12}$$

bestehend aus den Dimerspins α und β am Ort i. Mit $t_i^{\pm,0}$ werden entsprechend die Triplettzustände

$$t_i^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{ia}\downarrow_{ib} + \downarrow_{ia}\uparrow_{ib}), \qquad t_i^+ = \uparrow_{ia}\uparrow_{ib} \quad \text{oder} \quad t_i^- = \downarrow_{ia}\downarrow_{ib} \tag{G.13}$$

bestehend aus den Plakettenspins a und b am Ort i bezeichnet. Der Grundzustand des ungestörten Operators H_0 ist wegen der Triplett-Entartung 3^{2N_p}-fach entartet.

Anregungen des ungestörten Operators H_0 sind Zustände, bei denen mindestens ein Singulett

$$\sigma_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{i\alpha}\downarrow_{i\beta} - \downarrow_{i\alpha}\uparrow_{i\beta}) \tag{G.14}$$

mit der Anregungsenergie $W_\mu = W_0 + J_d$ angeregt wurde. Entwickelt wird um den Störungsterm $V = H_{p-d}(J_d = 0) = J_p \sum_{n=1}^{N_p} (\mathbf{S}_a^n + \mathbf{S}_b^n)(\mathbf{S}_\beta^n + \mathbf{S}_\alpha^{n+1})$.

Zur Berechnung aller relevanten Matrixelemente $\langle\phi_\mu|V|\phi_\nu\rangle$ reicht es, die Wirkung von V auf vier benachbarte Spins $(S_{i\alpha}, S_{i\beta}, S_{ia}, S_{ib})$ zu untersuchen.

$$\begin{aligned}
V|\tau_i^0 t_i^0\rangle &= \frac{1}{2}V(|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle + |\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle + |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle + |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle) \\
&= \frac{J_p}{2}(|\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\downarrow_b\rangle + |\downarrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle) = \frac{J_p}{2}(|\tau^+t^-\rangle + |\tau^-t^+\rangle)
\end{aligned}$$

$$V|\tau_i^+ t_i^-\rangle = V|\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\downarrow_b\rangle = \sqrt{2}\frac{J_p}{2}|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\, t^0\rangle = \frac{J_p}{2}(|\tau^0t^0\rangle + |\sigma t^0\rangle)$$

$$V|\tau_i^- t_i^+\rangle = V|\downarrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle = \sqrt{2}\frac{J_p}{2}|\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\, t^0\rangle = \frac{J_p}{2}(|\tau^0t^0\rangle - |\sigma t^0\rangle)$$

$$\begin{aligned}
V|\tau_i^0 t_i^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}V(|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle + |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle) \\
&= \frac{J_p}{2\sqrt{2}}(-|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle + |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle + |\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle + |\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle) \\
&= \frac{J_p}{2}(|\tau^+t^0\rangle - |\sigma t^+\rangle)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V|\sigma_i t_i^0\rangle &= \frac{1}{2}V(|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle + |\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle - |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle - |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle) \\ &= \frac{J_p}{2}(|\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\downarrow_b\rangle - |\downarrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle) \;=\; \frac{J_p}{2}(|\tau^+t^-\rangle - |\tau^-t^+\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V|\sigma t_i^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}V(|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle - |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle) \\ &= \frac{J_p}{2\sqrt{2}}(|\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\downarrow_a\uparrow_b\rangle + |\uparrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\downarrow_b\rangle - |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle - |\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\uparrow_a\uparrow_b\rangle) \\ &= \frac{J_p}{2}(|\tau^+t^0\rangle - |\tau^0t^+\rangle) \end{aligned}$$

Faßt man obige Ausdrücke in Matrixform zusammen, so ergibt sich

$$V\begin{pmatrix} \tau^+t^- \\ \tau^-t^+ \\ \tau^0t^0 \\ \sigma t^0 \end{pmatrix} = \frac{J_p}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 & +1 & +1 \\ 0 & -1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tau^+t^- \\ \tau^-t^+ \\ \tau^0t^0 \\ \sigma t^0 \end{pmatrix} \tag{G.15}$$

und

$$V\begin{pmatrix} \tau^0t^+ \\ \sigma t^+ \\ \tau^+t^0 \end{pmatrix} = \frac{J_p}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & +1 \\ -1 & 0 & +1 \\ +1 & +1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \tau^0t^+ \\ \sigma t^+ \\ \tau^+t^0 \end{pmatrix}. \tag{G.16}$$

Aus obigen Ausdrücken kann der effektive Hamiltonoperator $H_{eff}^{(1)} = P_0VP_0$ abgeleitet werden. Dieser Operator stimmt mit dem Heisenbergoperator der Spin-1-Kette überein, die $2N_p$ Spins enthält. Die nächsthöhere Ordnung $P_0VR_sVP_0$ führt zu einer Korrektur in der Ordnung $J_p^2/(4J_d)$.

Für ein Fragment der Länge $k = 1$ sollen hier auch die nächsten Korrekturen berechnet werden. Das Fragment besteht aus zwei Dimer-Paaren und einem vertikalen Plaketten-Paar. Der durch Isingzustände gebildete Basisraum hat demnach $2^6 = 64$ Zustände. Durch Beschränkung auf den Unterraum $S^z = 0$ reduziert sich die Basis auf $(6!)/(3!3!) = 20$ Zustände. Nutzt man dazu noch die Punktsymmetrien (horizontale und vertikale Spiegelung) und die Spininversion benötigt man nur noch 5 Basiszustände, die hier

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |\tau^0t^0\tau^0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\tau^+t^0\tau^-\rangle + |\tau^-t^0\tau^+\rangle) \\ |3\rangle &= \frac{1}{2}(|\tau^0t^-\tau^+\rangle + |\tau^+t^-\tau^0\rangle + |\tau^0t^+\tau^-\rangle + |\tau^-t^+\tau^0\rangle) \\ |4\rangle &= \frac{1}{2}(|\sigma t^-\tau^+\rangle + |\tau^+t^-\sigma\rangle + |\sigma t^+\tau^-\rangle + |\tau^-t^+\sigma\rangle) \\ |5\rangle &= |\sigma t^0\sigma\rangle \end{aligned}$$

aufgelistet sind. In dieser Basis sind die Diagonalelemente des ungestörten Operators $\langle H_0\rangle =$

$(J_d/2, J_d/2, J_d/2, -J_d/2, -3J_d/2)$ und der Störungsterm

$$V = \frac{J_p}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & 0 \\ 2 & \sqrt{2} & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{G.17}$$

Nun kann der Formalismus aus Abschnitt G.1 angewendet werden. Wegen der dreifachen Entartung des Grundzustandes des ungestörten Operators H_0 liefert die entwickelte Energie eine drei-mal-drei-Matrix, deren niedrigster Eigenwert auf die nach J_p entwickelte Energie des Fragmentes

$$E_0^{(4)} = \frac{1}{2}J_d - \frac{3}{2}J_p + \frac{5}{12}\frac{J_p^2}{J_d} - \frac{65}{216}\frac{J_p^3}{J_d^2} + \frac{1555}{3888}\frac{J_p^4}{J_d^3} + O(J_p^5/J_d^4) \tag{G.18}$$

führt. Der niedrigste Term $-3J_p/2$ entspricht dem Haldane-Fall mit drei Spins und offenen Randbedingungen.

G.3 Entwicklung um J_p für $J_d > 0$

Der Grundzustand des ungestörten Operators $H_0 = H_{d-p}(J_p = 0) = J_d \sum_{n=1}^{N_p} \mathbf{S}_\alpha^n \mathbf{S}_\beta^n$ für antiferromagnetische Dimerkopplung $J_d > 0$ ist

$$|\phi_0\rangle = \prod_{i=1}^{N_p} |\sigma_i t_i^{\pm,0}\rangle \tag{G.19}$$

und 3^{N_p} fach entartet. Die Energie dieses Zustandes ist $W_0 = -3N_pJ_d/4$. Anregungen des ungestörten Operators H_0 sind Zustände, bei denen mindestens ein Triplett $\tau_i^{\pm,0}$ mit der Anregungsenergie $W_\mu = W_0 + J_d$ angeregt wurde. Entwickelt wird um den Störungsterm $V = H_{p-d}(J_d = 0) = J_p \sum_{n=1}^{N_p} (\mathbf{S}_a^n + \mathbf{S}_b^n)(\mathbf{S}_\beta^n + \mathbf{S}_\alpha^{n+1})$.

Zur Berechnung aller relevanten Matrixelemente $\langle \phi_\mu | V | \phi_\nu \rangle$ reicht es, die Wirkung von V auf vier benachbarte Spins $(S_{i\alpha}, S_{i\beta}, S_{ia}, S_{ib})$ zu untersuchen. Das Ergebnis haben wir bereits im vorhergehenden Abschnitt in Matrixform G.15 und G.16 dargestellt. Man erkennt aus diesen Matrizen sofort, daß der effektive Hamiltonoperator $H_{eff}^{(1)} = P_0VP_0$ in erster Ordnung verschwindet. Die nächsthöhere Ordnung $P_0VR_sVP_0$ führt dann zur Wechselwirkung benachbarter Plakettenspins $t_i^{\pm,0}$ und $t_{i+1}^{\pm,0}$ und kann als effektive Spin-1-Austauschwechselwirkung mit zusätzlichem Diagonalterm

$$H_{eff}^{(2)} = \frac{J_p^2}{J_d} \sum_{i=1}^{N_p} \left(\frac{1}{2} \mathbf{S}_{ab}^i \mathbf{S}_{ab}^{i+1} - 1 \right) \tag{G.20}$$

gedeutet werden. Die nächsthöhere Korrektur ist von dritter Ordnung und proportional zu J_p^3/J_d^2.

G.4 Entwicklung um J_d für $J_p > 0$

Die Eigenzustände des ungestörten Operators $H_0 = H_{d-p}(J_d = 0) = J_p \sum_{n=1}^{N_p} (\mathbf{S}_a^n + \mathbf{S}_b^n)(\mathbf{S}_\beta^n + \mathbf{S}_\alpha^{n+1})$ sind

$$|\phi_\mu\rangle = \prod_i^{N_p} |p_l(i)\rangle, \tag{G.21}$$

wobei p_l einer der 16 Eigenzustände einer einzelnen Plakette am Ort i ist. Die Energie des Zustandes $|\phi_\mu\rangle$ ist $W_\mu = \sum_i^{N_p} w_l(i)$, wobei w_l die Energie der Plakette i ist. Der Grundzustand des ungestörten Operators H_0 für antiferromagnetische Plakettenkopplung $J_p > 0$ ist der Fall $p_l(i) = p_0(i)$ (für alle i) und ist nicht entartet. Die Energie dieses Zustandes ist $W_0 = -2N_pJ_p$. Jede Plakette $(S_{i\beta}, S_{ia}, S_{ib}, S_{(i+1)\alpha})$ befindet sich im Zustand

$$\begin{aligned} |p_0(i)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{12}}(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\tau_i^0 t_i^0\rangle - |\tau_i^+ t_i^-\rangle - |\tau_i^- t_i^+\rangle) \end{aligned} \tag{G.22}$$

mit einer Energie von $w_0 = -2J_p$. Dabei bezeichnet $\tau_i^{\pm,0}$ eines der Tripletts

$$\tau_i^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{i\beta}\downarrow_{(i+1)\alpha} + \downarrow_{i\beta}\uparrow_{(i+1)\alpha}), \qquad \tau_i^+ = \uparrow_{i\beta}\uparrow_{(i+1)\alpha} \quad \text{oder} \quad \tau_i^- = \downarrow_{i\beta}\downarrow_{(i+1)\alpha} \tag{G.23}$$

bestehend aus den Dimerspins α und β am Ort $i+1$ und i. Mit $t_i^{\pm,0}$ werden entsprechend die Triplettzustände

$$t_i^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{ia}\downarrow_{ib} + \downarrow_{ia}\uparrow_{ib}), \qquad t_i^+ = \uparrow_{ia}\uparrow_{ib} \quad \text{oder} \quad t_i^- = \downarrow_{ia}\downarrow_{ib} \tag{G.24}$$

bestehend aus den Plakettenspins a und b am Ort i bezeichnet. Der Gesamtspin des Zustandes p_0 ist $S = 0$.

Anregungen des ungestörten Operators H_0 sind die Zustände mit der Anregungsenergie $W_\mu = W_0 + w_l - w_0$, bei denen sich mindestens eine der Plaketten im angeregten Zustand mit $w_l = (-J_p, 0, J_p)$ befindet.

Die möglichen Anregungen der Plakette mit den Energien $W_\mu > W_0$ und den Gesamtspin S sind

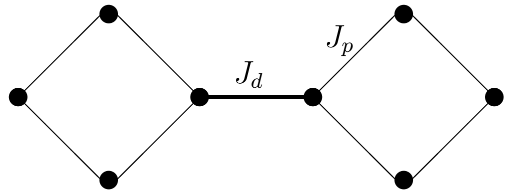
$$
\begin{aligned}
&|p_1(i)\rangle = (2|\tau_i^0 t_i^0\rangle + |\tau_i^+ t_i^-\rangle + |\tau_i^- t_i^+\rangle)/\sqrt{6} && \text{mit} \quad w_1 = +J_p, && S = 2,\\
&|p_2(i)\rangle = (|\tau_i^+ t_i^-\rangle - |\tau_i^- t_i^+\rangle)/\sqrt{2} && \text{mit} \quad w_2 = -J_p, && S = 1,\\
&|p_3(i)\rangle = |\sigma_i t_i^0\rangle && \text{mit} \quad w_3 = 0, && S = 1,\\
&|p_4(i)\rangle = (|\tau_i^+ t_i^0\rangle + |\tau_i^0 t_i^+\rangle)/\sqrt{2} && \text{mit} \quad w_4 = +J_p, && S = 2,\\
&|p_5(i)\rangle = (|\tau_i^- t_i^0\rangle + |\tau_i^0 t_i^-\rangle)/\sqrt{2} && \text{mit} \quad w_5 = +J_p, && S = 2,\\
&|p_6(i)\rangle = (|\tau_i^+ t_i^0\rangle - |\tau_i^0 t_i^+\rangle)/\sqrt{2} && \text{mit} \quad w_6 = -J_p, && S = 1,\\
&|p_7(i)\rangle = (|\tau_i^- t_i^0\rangle - |\tau_i^0 t_i^-\rangle)/\sqrt{2} && \text{mit} \quad w_7 = -J_p, && S = 1,\\
&|p_8(i)\rangle = |\tau_i^+ t_i^+\rangle && \text{mit} \quad w_8 = +J_p, && S = 2,\\
&|p_9(i)\rangle = |\tau_i^- t_i^-\rangle && \text{mit} \quad w_9 = +J_p, && S = 2,\\
&|p_{10}(i)\rangle = |\sigma_i t_i^+\rangle && \text{mit} \quad w_{10} = 0, && S = 1,\\
&|p_{11}(i)\rangle = |\sigma_i t_i^-\rangle && \text{mit} \quad w_{11} = 0, && S = 1,\\
&|p_{12}(i)\rangle = |\tau_i^+ s_i\rangle && \text{mit} \quad w_{12} = 0, && S = 1,\\
&|p_{13}(i)\rangle = |\tau_i^- s_i\rangle && \text{mit} \quad w_{13} = 0, && S = 1,\\
&|p_{14}(i)\rangle = |\tau_i^0 s_i\rangle && \text{mit} \quad w_{14} = 0, && S = 1 \quad \text{und}\\
&|p_{15}(i)\rangle = |\sigma_i s_i\rangle && \text{mit} \quad w_{15} = 0, && S = 0.
\end{aligned}
\tag{G.25}
$$

Die letzten vier Anregungen p_{12} bis p_{15} mit Singuletts $s_i = (\uparrow_{ia}\downarrow_{ib} - \uparrow_{ia}\downarrow_{ib})/\sqrt{2}$ werden nicht durch V erzeugt.

Zur Bestimmung der Wirkung von V in niedrigster Ordnung reicht es, zwei benachbarte Plaketten (8 Spins) zu betrachten, da durch einmaliges Anwenden von V nur Anregungen auftreten, bei denen sich zwei benachbarte Plaketten in einen S=1-Zustand befinden. Zur Berechnung aller relevanten Matrixelemente $\langle\phi_\mu|V|\phi_\nu\rangle$ reicht es daher, die Wirkung von V auf zwei benachbarte Plaketten $p(i)$ und $p(j = i+1)$ beziehungsweise acht benachbarte Spins $(S_{i\beta}, S_{ia}, S_{ib}, S_{(i+1)\alpha})(S_{(i+1)\beta}, S_{(i+1)a}, S_{(i+1)b}, S_{(i+2)\alpha})$ zu untersuchen. Die Platzindizes wurden zur besseren Übersichtlichkeit teilweise weggelassen.

$$
\begin{aligned}
V|p_0p_0\rangle &= V\frac{1}{3}(|\tau_i^0 t_i^0\rangle - |\tau_i^+ t_i^-\rangle - |\tau_i^- t_i^+\rangle)(|\tau_j^0 t_j^0\rangle - |\tau_j^+ t_j^-\rangle - |\tau_j^- t_j^+\rangle)\\
&= \frac{J_d}{12}(|\sigma_i t_i^0 \sigma_j t_j^0\rangle + |(\tau_i^+ t_i^- - \tau_i^- t_i^+)(\tau_j^+ t_j^- - \tau_j^- t_j^+)\rangle\\
&\quad +|\sigma_i t_i^0(\tau_j^+ t_j^- - \tau_j^- t_j^+)\rangle - |(\tau_i^+ t_i^- - \tau_i^- t_i^+)\sigma_j t_j^0\rangle\\
&\quad +|\tau_i^+ t_i^0 \tau_j^- t_j^0\rangle + |\tau_i^- t_i^0 \tau_j^+ t_j^0\rangle\\
&\quad -|\tau_i^+ t_i^0(\tau_j^0 t_j^- - \sigma_j t_j^-)\rangle - |\tau_i^- t_i^0(\tau_j^0 t_j^+ + \sigma_j t_j^+)\rangle\\
&\quad -|(\tau_i^0 t_i^- + \sigma_i t_i^-)\tau_j^+ t_j^0\rangle - |(\tau_i^0 t_i^+ - \sigma_i t_i^+)\tau_j^- t_j^0\rangle\\
&\quad +|(\tau_i^0 t_i^- + \sigma_i t_i^-)(\tau_j^0 t_j^+ + \sigma_j t_j^+)\rangle\\
&\quad +|(\tau_i^0 t_i^+ - \sigma_i t_i^+)(\tau_j^0 t_j^- - \sigma_j t_j^-)\rangle)\\
&= \frac{J_d}{12}(|p_3p_3\rangle + 2|p_2p_2\rangle + \sqrt{2}(|p_3p_2\rangle - |p_2p_3\rangle)\\
&\quad +2(|p_6p_7\rangle + |p_7p_6\rangle) + (|p_{10}p_{11}\rangle + |p_{11}p_{10}\rangle)\\
&\quad -\sqrt{2}(|p_7p_{10}\rangle - |p_{10}p_7\rangle) + \sqrt{2}(|p_6p_{11}\rangle - |p_{11}p_6\rangle)).
\end{aligned}
\tag{G.26}
$$

Die Symmetrien, Vertauschung der Plaketten und $S^z \Leftrightarrow -S^z$, bleiben erhalten.

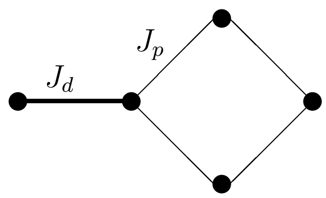


Störung 2-ter Ordnung in J_d enthält somit 7 Anregungen des obigen Clusters mit zwei benachbarten Plaketten, die sich im S=1-Zustand befinden. Die Energien $\langle H_0 - W_0 \rangle$ der Anregungen in der Reihenfolge des Auftretens in der obigen Summe sind $W_\mu - W_0 = \{4J_p, 2J_p, 3J_p, 2J_p, 4J_p, 3J_p, 3J_p\}$. Mit dieser Korrektur wird die Energie

$$E = -\frac{43}{576}\frac{J_d^2}{J_p} - \frac{25}{1728}\frac{J_d^3}{J_p^2} + O(4). \tag{G.27}$$

Erst für Störungstheorie vierter Ordnung treten Anregungen auf, die über drei benachbarte Plaketten reichen oder bei denen sich Plaketten im S=2-Zustand befinden.

Für den Fall endlicher Fragmentlängen wechselwirken die Randplaketten mit jeweils einem einzelnen Dimerspin. Die folgende Abbildung zeigt das linke Ende eines Kettenfragmentes.



Da der Randterm nicht mit k skaliert, muß der Randterm für $k \to \infty$ verschwinden. Störungstheorie in vierter Ordnung liefert für obigen Cluster

$$E = -\frac{11}{72}\frac{J_d^2}{J_p} - \frac{535}{31104}\frac{J_d^4}{J_p^3} + O(5) \quad . \tag{G.28}$$

Erweitert man den Cluster um eine weitere Plakette, so kommen weitere Terme von dritter und vierter Ordnung hinzu. Vergleich mit ED zeigt, daß e_k für $k \geq 2$ in 3-ter Ordnung noch einen Randterm über 2 Plaketten ($\approx -2 * 0.408 J_d^3/J_p^2$) enthält, der nicht mit k skaliert.

Literaturverzeichnis

[1] J. H. Van Vleck, *The Theory of Electric and Magnetic Suszeptibilities*, Oxford 1932, S. 104

[2] W. Heisenberg, *Zeits. f. Physik* **49**, 619 (1928)

[3] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **276**, 238, (1963)

[4] S. Feldkemper, W. Weber, J. Schulenburg and J. Richter, *Phys. Rev. B* **52**, 313 (1995) und Diplomarbeit von J. Schulenburg (Uni-Magdeburg)

[5] E. Ising, *Zeits. f. Physik* **31**, 253 (1925)

[6] H. Bethe, *Zeits. f. Physik* **71**, 205 (1931)

[7] L. Hulthén, *Arkiv Mat. Astron. Fys. A* **26**,1 (1938)

[8] J. des Cloizeaux, J.J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962)

[9] G. Burns, A.M. Glazer: *Space Groups for Solid State Scientists*, Academic Press, Inc. (1990)

[10] W. Lenz, *Zeits. f. Physik* **21**, 613 (1920)

[11] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117-149 (1944)

[12] G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950)

[13] Eine Liste der kritischen Temperaturen für verschiedene Gitter findet man unter `http://www.physik.tu-dresden.de/itp/members/kobe/isingphbl/`.

[14] K. Kubo, T. Kishi, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2585 (1988)

[15] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961)

[16] E.H. Lieb, D.C. Mattis, *J. o. Math. Phys.* **3**, 749 (1962)

[17] N.B. Ivanov and J. Richter, *Phys. Lett.* **232A**, 308 (1997)

[18] J. Richter, N.B. Ivanov, J. Schulenburg, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 3653 (1998)

[19] K. Ueda and S. Miyahara, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, L175 (1999)

[20] S. Zherlitsyn, S. Schmidt, B. Wolf, H. Schwenk, B. Lüthi, H. Kageyama, K. Onizuka, Y. Ueda, K. Ueda, *Phys. Rev. B* **62**, R6097 (2000)

[21] S.R. White, D.A. Huse, *Phys. Rev. B* **48**, 3844 (1993)

[22] O. Golinelli, Th. Jolicœur, R. Lacaze, *Phys. Rev. B* **50**, 3037 (1994)

[23] H. Niggemann, G. Uimin and J. Zittartz, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 9031 (1997) und *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 5217 (1998)

[24] H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N.V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C.P. Slichter, T. Goto, Y. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999)

[25] K. Onizuka, H. Kageyame, Y. Narumi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 1016 (2000)

[26] A. Koga, K. Okunishi, N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **62**, 5558-5563 (2000)

[27] M.P. Gelfand, *Phys. Rev. B* **43**, 8644 (1991)

[28] A. Honecker, F. Mila, M. Troyer, *Eur. Phys. J. B* **15**, 227-233 (2000)

[29] C. Gros, R. Valentí, J.V. Alvarez, K. Hamacher, W. Wenzel, *Phys. Rev. B* **62** R14617 (2000)

[30] B. Wolf, S. Zherlitsyn, S. Schmidt, B. Lüthi, H. Kageyama, Y. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4847-4850 (2001)

[31] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997)

[32] B.I.Halperin, P.C.Hohenberg, *Phys. Rev.* **188**, 898-918 (1969)

[33] D.D. Betts, G.E. Stewart, *Can. J. Phys.* **75** 47 (1977)

[34] J. Oitmaa, C.J. Hamer, W. Zheng, *Phys. Rev.* B **50** 3877 (1994)

[35] G.E. Stewart, D.D. Betts, J.S. Flynn, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 3231 (1997)

[36] J.N. Lyness, T. Sorevik, P. Keast, *Mathematics of Computation* **56** 243 (1992)

[37] Brendan D. McKay, Computer Science Department, Australien National University, program nauty v1.5 `http://cs.anu.edu.au/people/bdm/nauty/`

[38] D.D.Betts, J.Schulenburg, G.E.Stewart, J.Richter, J.S.Flynn, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 7685-7698 (1998)

[39] T. Kennedy, E.H. Lieb, B.S. Shastry, *J. Stat. Phys.* **53**, 1019 (1988)

[40] J.K. Cullum, R.A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*, Birkhäuser 1985

[41] H. Neuberger, T. Ziman, *Phys. Rev. B* **39**, 2608 (1989)

[42] D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* **39**, 11783 (1989)

[43] P. Hasenfratz, H. Leutwyler, *Nuclear Phys. B* **343**, 241 (1990)

[44] P.Hasenfratz, F.Niedermayer, *Z. Phys. B* **92**, 91-112 (1993), `hep-lat/9212022`

[45] Zheng Weihong and C. J. Hamer, *Phys. Rev. B* **47**, 7961-7970 (1993)

[46] A.M. Olès, B. Olès, *J. Phys. : Condens. Matter* **5**, 8403 (1993)

[47] D.C. Hoaglin, F. Mostelle, J.W. Turkey, *Understanding Robust and Exploratory Data Analysis* (New York: John Wiley & Sons), 366 (1983)

[48] T. Einarsson and H.J. Schulz, *Phys. Rev. B* **51**, 6151-6154 (1995)

[49] J. Schulenburg, J.S. Flynn, D.D. Betts, J. Richter, *Eur. Phys. J. B* **21**, 191-204 (2001)

[50] B. Grünbaum, G.C. Shephard, *Tilings and Patterns*, W.H. Freeman and Company, New York (1987)

[51] N.D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133, (1966)

[52] P.C. Hohenberg, *Phys. Rev,* **158**, 383, (1967)

[53] Shang-keng Ma, R. Rajaraman, *Phys. Rev. D* **11**, 1701, (1975)

[54] H. Stöcker, *Taschenbuch der Physik*, Verlag Harri Deutsch 1993

[55] G. Burns, A.M. Glazer,*Space Groups for Solid State Scientists*, 2nd Ed., Academic Press Inc., 1990

[56] M. Klemm, *Symmetrien von Ornamenten und Kristallen*, Springer Verlag, 1982

[57] R.J. Birgeneau, G. Shirane, in *Physical Properties of High Temperature Superconducters*, ed. D.M. Ginsberg, World Scientific, 1989

[58] *High Temperature Superconductivity*, ed. J.W. Lynn, Ch. 8, Springer Verlag, 1990

[59] J. Richter, S.E. Krüger, A. Voigt, C. Gros, *Europhys. Lett.* **28**, 363 (1994)

[60] S. Kobe, T. Klotz, *Phys. Rev. E* **52**, 5660 (1995)

[61] C. Lhuillier, P. Sindzingre, J.-B. Fouet, `cond-mat/0009336 v2`, 2000

[62] R. Singh, M. Gelfand, D. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2484 (1988)

[63] T. Xiang, J. Lou, Z. Su, *Phys. Rev. B* **64**, 104414 (2001)

[64] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952)

[65] J. D. Reger, A. P. Young, *Phys. Rev. B* **37**, 5978 (1988)

[66] E. Dagotto, A. Moreo, *Phys. Rev. B* **38**, 5087 (1988)

[67] S. Tang, J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **39**, 4548 (1989)

[68] M. Gross, E. Snchez-Velasco, E. Siggia, *Phys. Rev. B* **39**, 2484 (1989)

[69] J. Carlson, *Phys. Rev. B* **40**, 846R (1989)

[70] T. Barnes, M. D. Kovarik, *Phys. Rev. B* **42**, 6159 (1990)

[71] T. Barnes, *Int. J. Mod. Phys. C* **2**, 659-709 (1991)

[72] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1-62 (1991)

[73] K.J. Runge, *Phys. Rev. B* **45**, 7229 (1992)

[74] D. D. Betts, S. Masui, N. Vats, G.E. Stewart, *Can. J. Phys.* **74**, 54 (1996)

[75] A.W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **56**, 11678 (1997)

[76] D.D. Betts, H.Q. Lin, J.S. Flynn, *Can. J. Phys.* **77**, 353 (1999)

[77] H.-Q. Lin, J.S. Flynn, D.D. Betts, *Phys. Rev. B* **64**, 214411 (2001)

[78] P. Anderson, *Mater. Res. Bull.* **8**, 153 (1973)

[79] P. Fazekas, P. Anderson, *Philos. Mag.* **30**, 423 (1974)

[80] V. Kalmeyer, R.B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2095 (1987)

[81] D.A. Huse, V. Elser, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2531 (1988)

[82] Th. Jolicoeur, J.C.Le Guillou, *Phys. Rev. B* **40**, 2727R (1989)

[83] S.J. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 983 (1992)

[84] B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2590 (1992)

[85] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, *Physica Scripta* **49**, 192 (1993)

[86] R. Deutscher, Dissertation, Uni Hannover 1993 (auch cond-mat/9306044)

[87] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, L. Pierre, *Phys. Rev. B* **50**, 10048 (1994), Die markierten QDJS (Sterne) in Tabelle I sind teilweise falsch.

[88] A.E. Trumper, *Phys. Rev. B* **60**, 2987 (1999)

[89] L.O. Manuel, H.A. Ceccatto, *Phys. Rev. B* **60**, 9489 (1999)

[90] L. Capriotti, A.E.Trumper, S.Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3899 (1999)

[91] S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4558 (1998)

[92] L. Capriotti, *Int. J. of Mod. Phys. B* **15**, 1799 (2001)

[93] Z. Weihong, J. Oitmaa, C.J. Hamer, *Phys. Rev. B* **44**, 11869 (1991)

[94] J. Oitmaa, C.J. Hamer, Z. Weihong, *Phys. Rev. B* **45**, 9834, (1992)

[95] A. Mattsson, P. Fröjdh, T. Einarsson, *Phys. Rev. B* **49**, 3997 (1994)

[96] J.D. Reger, J.A. Riera, A.P. Young, *J. Phys. C* **1**, 1855 (1989)

[97] J.B. Fouet, P.Sindzingre, C. Lhuillier, *Eur. Phys. J. B* **20**, 241 (2001)

[98] S.E. Krüger, J. Richter, *Phys. Rev. B* **64**, 024433 (2001)

[99] D.D. Betts, Proc.N.S.Inst.Sci **40**, 95-100 (1995)

[100] D. Schmalfuss, P. Tomczak, J. Schulenburg, J. Richter, *Phys. Rev. B* **65**, 224405 (2002)

[101] G. Misguich, C. Lhuillier, B. Bernu, C. Waldtmann, *Phys. Rev. B* **60**, 1064 (1999)

[102] S. Miyahara, M. Troyer, D.C. Johnson,K. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 3918-3923 (1998)

[103] B. Normand, K. Penc, M. Albrecht, F. Mila, *Phys. Rev. B* **56**, R5736 (1997)

[104] C. Zeng, V. Elser, *Phys. Rev. B* **42**, 8436 (1990)

[105] A. Chubukov, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 832-835 (1992)

[106] J.T. Chalker, P.C.W. Holdsworth, E.F. Shender, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 855-858 (1992)

[107] D.A. Huse, A.D. Rutenberg, *Phys. Rev. B* **45**, 7536 (1992)

[108] P.W. Leung, V. Elser, *Phys. Rev. B* **47**, 5459 (1993)

[109] J.N. Reimers, A.J. Berlinsky, *Phys. Rev. B* **48**, 9539 (1993)

[110] K. Yang, L.K. Warman, S.M. Girvin, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2641 (1993)

[111] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, P. Sindzingre, *Phys. Rev. B* **56**, 2521 (1997)

[112] F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2356 (1998)

[113] Ch. Waldtmann, H.-U. Everts, B. Bernu, P. Sindzingre, C. Lhuillier, P. Lecheminant, L. Pierre, *Eur. Phys. J. B* **2**, 501-507 (1998)

[114] Ch. Waldtmann, H. Kreutzmann, U. Schollwöck, K. Maisinger, H.-U. Everts, *Phys. Rev. B* **62**, 9472 (2000)

[115] Weiqiang Yu, Shiping Feng, *Eur. Phys. J. B* **13**, 265-269 (2000)

[116] M. Mambrini, F. Mila, *Eur.Phys.J. B* **17**, 651-659 (2000)

[117] S.M. Sergeev, *Journal of Nonlinear Math. Physics* **7**, 57-72 (2000)

[118] R. Shankar, D. Shubashree, *Phys. Rev. B* **61**, 12126 (2000)

[119] B.S. Shastry, B. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981)

[120] M. Albrecht, F. Mila, Europhys.Let. **34** 145 (1996), (for the case $J_2 = J_1$)

[121] E. Müller-Hartmann, R.R.P. Singh, C. Knetter, G.S. Uhrig, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1808 (2000)

[122] T. Momoi, K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **61**, 3231 (2000)

[123] G. Misguich, Th. Jolicoeur, S. M. Girvin, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 97203 (2001)

[124] S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui, Y. Kobayashi, M. Sato, T. Nishioka, M. Kontani, K. Sano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2758 (1995)

[125] K. Ueda, H. Koutani, M. Sigrist, P.A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1932 (1996), Gl. (6) muss entsprechend [128] Gl. (3) korrigiert werden, wodurch sich $(J'/J)_c = 1.215$ auf $(J'/J)_c = 1.008$ verringert.

[126] M. Troyer, H. Kontani, K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3822 (1996)

[127] O.A. Starykh, M.E. Zhitomirsky, D.I. Khomskii, R.R.P. Singh, K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2558 (1996)

[128] M.P. Gelfand, Z. Weihong, R.R.P. Singh, J. Oitmaa, C.J. Hamer, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2794 (1996)

[129] M. Albrecht, F. Mila, *Phys. Rev. B* **53**, R2945 (1996)

[130] M. Albrecht, F. Mila, D. Poilblanc, *Phys. Rev. B* **54**, 15856 (1996)

[131] Z. Weihong, M.P. Gelfand, R.R.P. Singh, J. Oitmaa, C.J. Hamer, *Phys. Rev. B* **55**, 11377 (1997)

[132] I. Bose, A. Ghosh, *Phys. Rev. B* **56**, 3149 (1997)

[133] T. Ohama, H. Yasuoka, M. Isobe, Y. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 23 (1997)

[134] K. Kodama, H. Harashina, H. Sasaki, Y Kobayashi, M. Kasai, S. Taniguchi, Y. Yasui, M. Sato, K. Kakurai, T. Mori, M. Nishi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 793 (1997)

[135] W.E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1746 (1997)

[136] L. O. Manuel, M. I. Micheletti, A. E. Trumper, H. A. Ceccatto, *Phys. Rev. B* **58**, 8490 (1998)

[137] Z. Weihong, J. Oitmaa, C.J. Hamer, *Phys. Rev. B* **58**, 14147 (1998)

[138] K. Takano, K. Sano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 4209 (1998)

[139] M.A. Korotin, I.S. Elfimov, V.I. Anisimov, M. Troyer, D.I. Khomskii, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1387 (1999)

[140] C.S. Hellberg, W.E. Pickett, L.L. Boyer, H.T. Stokes, M.J. Mehl, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3489 (1999)

[141] Y. Fukumoto, A. Oguchi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3655 (1999)

[142] P. Tomczak, J. Richter, *Phys. Rev. B* **59**, 107-110 (1999)

[143] P. Tomczak, J. Schulenburg, J. Richter, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 3851-3857 (2001)

[144] J.H. Barry, M. Khatun, *Phys. Rev. B* **51**, 5840 (1995)

[145] R. Moessner, J.T. Chalker, Phys. Rev. Lett. **80**, 2929 (1998)

[146] B. Canals, C. Lacroix, Phys. Rev. Lett. **80**, 2933 (1998)

[147] J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter, J. Schulenburg, Eur. Phys. J. B **24**, 475 (2001)

[148] C. Lanczos, *J. Res. Natl. Bur. Stnd.* **45**, 255 (1950)

[149] C.C. Paige, *J. Inst. Maths. Appl.* **10**, 373 (1972)

[150] H.Q. Lin, *Phys. Rev. B* **42**, 6561 (1990)

[151] Das Programmpaket „spinpack" ist eine plattformunabhängige Implementierung des Lanczos-Algorithmus in C/C++ für Heisenberg-, XXZ-, tJ- und Hubbardmodelle. Es ist als Quellcode über die Homepage des Autors verfügbar (2001): `http://www-e.uni-magdeburg.de/jschulen/`

Lebenslauf

Jörg Schulenburg
Gutenbergstr. 24
39106 Magdeburg
Germany

Persönliche Angaben

geboren am:	10. Februar 1969
geboren in:	Rostock-Warnemünde
Familienstand:	ledig
Staatsangehörigkeit:	deutsch

Schulbildung:

1975 bis 1985	Polytechnische Oberschule in Gardelegen
1985 bis 1988	Betriebsberufsschule in Greifswald
Schulabschluß:	Maschinist für Kernkraftwerke mit Abitur

Studium:

1989 bis 1994	Studium der Physik an der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg
August 1994	Abschluß als Diplom-Physiker

berufliche und sonst. Tätigkeiten:

1988 bis 1988	wissenschaftlicher Assistent im KKW Greifswald
1988 bis 1989	Wehrdienst
1989	Maschinist im KKW Stendal
seit 1994	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am „Institut für Theoretische Physik“ der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg

Magdeburg, den 26. August 2002