

Dynamik und räumliche Korrelationen in verallgemeinerten Spinleitern

Vom Fachbereich Physik
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Phys. Ulrich Neugebauer

geb. am 4. Januar 1968 in Hannover

1997

Referent: Prof. Dr. H.-J. Mikeska
Korreferent: Prof. Dr. H.-U. Everts
Tag der Promotion: 18. Dezember 1997

Kurzzusammenfassung

Dynamik und räumliche Korrelationen in verallgemeinerten Spinleitern

In der vorliegenden Arbeit wird das Phasendiagramm der antiferromagnetischen (af) $S = 1/2$ Spinleiter mit zusätzlicher Wechselwirkung auf den Diagonalen untersucht. Verschiedene bekannte Grenzfälle sind die $S = 1/2$ Kette mit konkurrierenden Wechselwirkungen der nächsten (nn) und übernächsten (nnn) Nachbarn, die $S = 1/2$ Spinkette mit alternierenden nn Wechselwirkungen und die af $S = 1$ Kette. Die Majumdar–Ghosh–(MG)–Grundzustände werden als Matrix–Produkt–(MP)–Zustände formuliert und zeigen eine dem Fall der af $S = 1$ Kette vergleichbare verborgene Ordnung. Unter Verwendung von verallgemeinerten MP–Zuständen werden Variationsrechnungen der Grundzustandsenergie und Berechnungen der Korrelationen durchgeführt sowie solitonische Anregungen konstruiert, die die bekannten Resultate der af $S = 1$ Kette reproduzieren. Es werden exakte Diagonalisierungen (ED) endlicher Systeme durchgeführt, und die Ergebnisse stimmen in weiten Teilen des Phasendiagramms gut mit denen des MP–Ansatzes überein. Die Resultate stützen die Annahme, daß das vollständig dimerisierte Modell und das MG–Modell in derselben Phase liegen wie die af $S = 1$ Kette.

Unter Verwendung des Kernpolynomverfahrens werden die thermodynamischen Eigenschaften von Spinleitern bestimmt. Vergleiche mit Bethe–Ansatz Resultaten und Quanten–Monte–Carlo Daten geben Hinweise auf die Fehlergrenzen und stützen die Verlässlichkeit des Verfahrens.

Es werden die Auswirkungen unmagnetischer Verunreinigungen in Spinleitern mit Variationsansätzen und numerischen Verfahren untersucht. Die Wechselwirkung zwischen den defektinduzierten ungepaarten Spins wird durch eine effektive Wechselwirkung beschrieben, deren Stärke durch den Abstand und die Position der Verunreinigungen bestimmt ist. Ungepaarte Spins an den Rändern und im Inneren beeinflussen in unterschiedlicher Weise die angrenzenden Leiterbereiche. Die numerischen Resultate (ED) werden mittels MP–Rechnungen interpretiert. DMRG–Resultate für bis zu sechs Verunreinigungen werden zitiert und stützen die Annahme einer effektiven Beschreibung durch Paarwechselwirkungen. Es wird das Auffüllen der Anregungslücke der Spinleiter mit zunehmender Defektkonzentration diskutiert und argumentiert, daß eine verunreinigte Spinleiter bei tiefen Temperaturen immer eine Curie–Suszeptibilität zeigt.

Bei der Interpretation von Neutronenstreuexperimenten an der Leitersubstanz $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ werden analytische Resultate und numerische Berechnungen des statischen Strukturfaktors vorgestellt. Die in den Experimenten gefundenen Anregungslücken und die ferromagnetischen Korrelationen können als Folge von Defektpaaren in freien Spinleitern verstanden werden.

Schlagnworte: Quantenspinsysteme, Spinleitern, Exakte Diagonalisierung

Abstract

Dynamics and spatial correlations in generalized spin ladders

We investigate the phase diagram of the antiferromagnetic (af) spin ladder with additional interactions on the diagonals. The model includes several well known limiting cases as the $S = 1/2$ chain with competing interaction between nearest and next nearest neighbours, the $S = 1/2$ chain with alternating exchange and the af $S = 1$ chain. The ground states of the Majumdar-Ghosh model are formulated as matrix product (MP) states with a hidden order related to the one found in the $S = 1$ (Haldane) chain. Using a generalized MP-Ansatz we perform variational calculations of the ground state energy and correlation length. The low-lying spectrum is computed by the construction of solitonic excitations which reproduce the known results in the $S = 1$ limit. The results of exact diagonalizations (ED) of finite systems are in good agreement with the predictions of the matrix product formalism in the main part of the phase diagram. This leads to the conjecture that the dimerized model and the Majumdar-Ghosh model are in the same phase as the regular ladder and the af $S = 1$ chain.

To investigate the thermodynamic properties of spin ladders a kernel polynomial method is used. The comparison with exact Bethe-Ansatz results, numerical data from exact diagonalizations and Quantum-Monte-Carlo calculations are used to determine error bars and limits of confidence.

The effect of non magnetic impurities in regular spin ladders is investigated by variational calculations of the matrix product type and numerical calculations. The interaction between the defect induced unpaired spins is described by an effective interaction with the strength depending on the relative and global positions of the defects. Unpaired spins at the edge and in the bulk have different effects on the local neighbourhood. The numerical results (ED) are compared with MP-calculations, DMRG results for chains with up to six impurities are cited and are qualitatively good interpreted by an effective pair model. The filling of the gap with increasing impurity concentration is discussed and leads to the conclusion of a low temperature Curie susceptibility of doped ladders.

Keywords: Quantum Spin Systems, Spin Ladders, Exact Diagonalization

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Die verallgemeinerte Spinleiter	9
1.1 Einleitung	9
1.2 Grenzfälle und Pfade im Phasendiagramm	11
1.3 Matrix–Produkt–Zustände	13
1.3.1 Formulierung des Ansatzes	15
1.3.2 Variationsrechnung für die Energie	19
1.3.3 Korrelationen	19
1.3.4 Anregungen	20
1.4 Numerische Verfahren	24
1.4.1 Das Lanczos–Verfahren	25
1.4.2 Auswertung der Daten, Extrapolation	32
1.5 Ergebnisse	33
2 Thermodynamische Größen der Spinleiter	53
2.1 Kernpolynomverfahren	54
2.1.1 Stochastische Berechnung	56
2.2 Ergebnisse	57
3 Verunreinigungen in Spinleitern	65
3.1 Einleitung	65
3.2 Konsequenzen des Lieb–Mattis–Theorems	67
3.3 Defekte am Rand offener Leitern	70
3.3.1 Numerische Resultate	70
3.3.2 Analytische Zugänge	72
3.4 Defekte im Inneren der Spinleiter	76
3.4.1 Numerische Ergebnisse	76

INHALTSVERZEICHNIS

3.5	Lokale defektinduzierte Magnetisierung	79
3.6	Numerischer Test der effektiven Beschreibung	82
3.7	Korrelationsfktn. und Neutronenstreuquerschnitt	85
4	Zusammenfassung	95
A	Normierung	99
B	Grundzustandsenergie	101
C	Normierung der Anregungen	103
D	Anregungsenergien	107
E	Tripletanregung	111
F	Lokale Magnetisierung im MP-Formalismus	115
	Literaturverzeichnis	117

Einleitung

Niederdimensionale Quantenspinsysteme sind in den letzten Jahren immer wieder in den Mittelpunkt des Interesses gerückt. Die exakte Lösung des eindimensionalen $s = 1/2$ Heisenberg Antiferromagneten (1D HAFM), die mit der Formulierung des Bethe–Ansatzes 1931 begann und deren Auswertung bis heute andauert, schien die wesentlichen Aspekte der klassischen Theorie widerzuspiegeln. Die Abweichungen durch Quanteneffekte waren eher quantitativer Natur. Die Quantenfluktuationen reduzierten die klassische langreichweitige Ordnung im Grundzustand auf eine quasilangreichweitige Ordnung mit algebraischen Korrelationen. Die Dispersionsrelation blieb in ihrer funktionalen Abhängigkeit unverändert, und nur der Vorfaktor wurde modifiziert.

Daß dieses Bild jedoch nicht vollständig war und Quanteneffekte bei isotropen, eindimensionalen Quantenspinsystemen wesentlich drastischere Abweichungen vom klassischen Verhalten hervorrufen können, sagte Haldane bereits 1983 voraus [1]. Der Inhalt seiner Vermutung war:

Systeme mit ganzzahligem Spin hätten einen ungeordneten Grundzustand mit exponentiell zerfallenden Spin–Spin–Korrelationen und eine Anregungslücke, diejenigen hingegen mit halbzahligem Spin sollen einen geordneten Grundzustand mit algebraisch zerfallenden Spin–Spin–Korrelationen aufweisen und keine Anregungslücke besitzen. Die in den nachfolgenden Jahren erbrachten Ergebnisse bestätigten diese Vermutung einerseits durch exakte Resultate eines von Affleck, Kennedy, Lieb und Tasaki [2] eingeführten Modells, das die wesentlichen Eigenschaften des $S=1$ Heisenberg Antiferromagneten (HAFM) besaß, andererseits durch numerische Resultate mittels exakter Diagonalisierungen (ED) [3], Dichte–Matrix–Renormierungsgruppen–(DMRG)–[4] und Quanten–Monte–Carlo–Rechnungen [5] sowie auch in experimenteller Hinsicht durch Messungen an quasieindimensionalen Substanzen, insbesondere NENP [6, 7, 8, 9, 10].

Die Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung durch Bednorz und Müller [12] in schwach dotierten Antiferromagneten hat die Aktivitäten im Bereich der zweidimensionalen (2D) Quantenspinsysteme verstärkt. Die heutigen Cuprat–Isolatoren sind ein sehr gutes Beispiel für isotrope, planare $S=1/2$ Antiferromagnete auf dem Quadratgitter [13]. Die langreichweitige Ordnung der dieses Gitter bildenden CuO_2 –Ebenen wird durch die Dotierung zerstört. Es bildet sich mit zunehmender Lochkonzentration erst eine Spinglas– und dann eine metallische Phase aus, die mit sinkender Temperatur supraleitend wird. Um zu einem besseren Verständnis derartiger Phänomene zu gelangen, sind Quantenspinsysteme mit den verschiedensten Methoden untersucht worden.

Bei den eindimensionalen Systemen existieren zusätzlich zu dem $S = 1/2$ HAFM noch weitere integrable Modelle, wie der $S = 1$ HAFM mit zusätzlichem biquadratischen Austausch der Stärke $\pm J$ [14, 15]. Sie sind zugleich Wegweiser und Kontrolle für folgende Untersuchungen.

Im Gegensatz zu diesen sehr speziellen Modellen ermöglicht die Ableitung einer feldtheoretischen Beschreibung es, ausgehend von der quantenmechanischen Zustandssumme, ganze Familien von Systemen zu behandeln. Dabei führte die Abbildung auf die Zustandssumme des nichtlinearen σ -Modells (NL σ M) [1] zusammen mit Renormierungsgruppenrechnungen Haldane zu der Aussage über halb- und ganzzahlige isotrope Spinketten.

Weitere Näherungsmethoden sind Spinwellentheorie, Störungstheorie, Reihenentwicklungen und Variationsrechnungen sowie eine von Anderson eingeführte Beschreibung mit unkorrelierten Singlettproduktzuständen, den sogenannten Resonating-Valence-Bond (RVB) Zuständen.

Ein hervorragender Test der Näherungsmethoden ist der Vergleich mit Resultaten aus exakten Diagonalisierungen (ED). Diese sind jedoch, da der Hilbertraum exponentiell mit der Anzahl der Freiheitsgrade wächst, auf kleine Systeme beschränkt. Weit größere auf eindimensionale Strukturen beschränkte Systeme sind mit Dichtematrix-Renormierungsgruppen-(DMRG)-Rechnungen zu behandeln. Größere höherdimensionale Systeme können mit Quanten-Monte-Carlo-(QMC)-Rechnungen untersucht werden, liefern aber im Gegensatz zu den beiden anderen Verfahren nur Ergebnisse für endliche Temperaturen.

Das wachsende Interesse an nicht isotropen Wechselwirkungen in dem 1D HAFM führte zur Hinzunahme einer Isinganisotropie. Die damit mögliche störungstheoretische Betrachtung des Modells gestattete zusätzlich die Behandlung eines Magnetfeldes in Richtung der ausgezeichneten Achse und einer ebenso ausgerichteten Ein-Ionen-Anisotropie. Diese Anisotropien waren insbesondere für ganzzahlige S interessant, da sie die Bildung einer neuen sogenannten Haldanephase charakterisierten und zum Verständnis der verborgenen Ordnung in diesem System beitrugen.

Da der HAFM in zwei Dimensionen auf dem Quadratgitter einen geordneten Grundzustand aufweist [13], wurde versucht, den Effekt der Quantenfluktuationen durch frustrative Effekte der Gittergeometrie selbst zu verstärken. Doch auch auf dem Dreiecksgitter existiert ein geordneter Grundzustand. Momentan ist der HAFM auf dem Kagomegitter ein Kandidat für einen ungeordneten Grundzustand. Eindeutige Resultate sind jedoch bisher nicht vorhanden. Experimentelle Hinweise auf einen 2D HAFM mit einer Anregungslücke über einem ungeordneten Grundzustand sind durch Messungen an CaV_4O_9 [16] gegeben. Die Gitter-

struktur dieser Substanz ist die eines zu einem fünftel geleerten Quadratgitters. Eine Erweiterung des RVB-Ansatzes, der Plaquette-RVB-Ansatz [17], wurde als eine mögliche Erklärung der beobachteten Eigenschaften vorgeschlagen.

Auch in einer Dimension variierte man das Gitter durch Hinzunahme einer Wechselwirkung zwischen den übernächsten Nachbarn (NNN). Dabei beobachtete man ab einer kritischen NNN-Kopplung α das Ausbilden einer Anregungslücke [18, 19]. Dieser Übergang ist ausgiebig untersucht worden [20, 21, 18], und der zur Zeit genaueste Wert für die kritische Kopplung ist $\alpha_c = 0.241156J$ [19, 18]. An dieser Stelle ist das entsprechende feldtheoretische Modell konform invariant.

Die früher bereits untersuchte Zwischenkettenkopplung war erneut von Interesse bei der Frage nach der Art des Übergangs von einer Dimension zu zwei Dimensionen. Diesen Übergang sollten gekoppelte Ketten, Spinleitern, mit einer wachsenden Anzahl von Holmen darstellen [22].

Die vorliegende Arbeit untersucht die Ordnung und die Dynamik in reinen und verunreinigten Spinleitern, deren experimentelle Realisierung bereits durch eine Vielzahl von Substanzen gelungen ist.

SrCuO_2 [23, 24] besteht aus übereinander angeordneten CuO_2 -Ebenen und zeigt bei Dotierung supraleitende Eigenschaften. Aufgrund der extremen Bedingungen bei der Herstellung ist SrCuO_2 jedoch instabil oberhalb einer kritischen Temperatur. Die CuO_2 -Ebenen brechen auf, und es bilden sich Spinleitern mit sinkender Anzahl von Holmen aus, die durch eine schwache frustrierte zickzack-Kopplung verbunden sind.

SrCu_2O_3 [25] stellt eine Leitersubstanz, bestehend aus zwei gekoppelten Ketten, dar. $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ [25] realisiert eine Leitersubstanz mit drei Ketten. $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [26] ist eine von drei stabilen Sr-Cu-O Verbindungen und im Gegensatz zu den vorgestellten Cupraten als Einkristall verfügbar. Es besteht aus größtenteils unabhängigen CuO_2 Ketten und Cu_2O_3 Leitern. Die beiden anderen bei Raumtemperatur stabilen Verbindungen sind Sr_2CuO_3 , bestehend aus einfachen Cu-Ionen Ketten und SrCuO_2 , in der die Cu-Ionen zickzack-Ketten bilden.

Die $S = 1/2$ Heisenberg Spinleiter, bestehend aus zwei gekoppelten Ketten, wird durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben:

$$H_{\text{Leiter}} = J_{\text{Holm}} \sum_{i,j=1,2} \vec{S}_{i,j} \vec{S}_{i+1,j} + J_{\text{Sprosse}} \sum_i \vec{S}_{i,1} \vec{S}_{i,2},$$

wobei der erste Index die Sprossen und der zweite die Holme benennt.

Bereits bei der Untersuchung an der Tieftemperaturphase von SrCuO_2 wurde, obwohl es keine Möglichkeiten zu frustrativen Effekten gab, eine dramatische

Abhängigkeit der magnetischen Eigenschaften von der Anzahl der gekoppelten Ketten beobachtet. Ähnlich wie im Haldanefall existiert eine Voraussage über die Eigenschaften von Spinleitern, die analog zum Unterschied zwischen halbzahligen und ganzzahligen Spinketten zu sehen ist.

Leitern mit einer geraden Anzahl von Ketten zeigen im Grundzustand den Charakter einer Spinflüssigkeit. Die Spins sind nicht ungeordnet sondern in einem isolierten quanten-kohärenten Grundzustand, haben exponentielle Spin-Spin-Korrelationen und eine endliche Anregungslücke [27], die den Singlettgrundzustand von der ersten Anregung, einem Triplet, trennt. Diese Leitern sind ein Modell, das näherungsweise einen von Anderson [28] beschriebenen eindeutigen Singlettgrundzustand, den RVB-Zustand, realisiert.

Leitern mit einer ungeraden Anzahl von Ketten verhalten sich grundverschieden. Sie sind der einzelnen Kette sehr ähnlich, besitzen also keine Anregungslücke und haben algebraisch zerfallende Korrelationen.

Die experimentelle Bestätigung dieser unterschiedlichen Eigenschaften ist mittlerweile an einer Vielzahl von Substanzen gelungen. Suszeptibilitätsmessungen an SrCu_2O_3 [25] zeigen das für eine Anregungslücke typische exponentielle Verschwinden bei niedrigen Temperaturen. Neutronenstreuexperimente (NS) [29] und Myon-Spin-Resonanzmessungen (μSR) [30] bestätigen die kurzreichenden Spin-korrelationen und Resonanzmessungen an den Kernmomenten (NMR) [31] die Anregungslücke. $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ [25] zeigt aufgrund der schwachen Zwischenleiterwechselwirkung sogar langreichweitige Ordnung bei niedrigen Temperaturen.

Eine Erklärung der Unterschiede zwischen Leitern mit gerader und ungerader Anzahl von gekoppelten Ketten wurde von Khveshchenko [32] auf der Basis eines Arguments, das Haldane für das Quadratgitter benutzte [33], gegeben. Bei der Abbildung der Spinleiter auf das $\text{NL}\sigma\text{M}$ gibt es einen topologischen Term in der effektiven Wirkung, der die Dynamik bei großen Wellenlängen bestimmt und der nur für eine ungerade Anzahl von Ketten in Erscheinung tritt.

Eine weitere Analogie ist durch den Übergang zu stark ferromagnetisch gekoppelten Ketten gegeben. Die dann auf den Sprossen entstehenden Triplets beschreiben den 1D $S=1$ HAFM. Der Grenzfall stark antiferromagnetischer Kopplung auf den Sprossen führt in ähnlicher Weise auf eine vollständig dimerisierte Leiter mit Singletts auf den Sprossen. Es ist nicht möglich, durch Variation der Kopplung auf den Sprossen von der Haldanephase in die Dimerphase zu gelangen, ohne den singulären Punkt zweier entkoppelter Ketten zu überschreiten.

Dieser singuläre Punkt kann jedoch durch eine zusätzliche Kopplung auf den Diagonalen umgangen werden. Der entsprechende Hamiltonoperator der so verallgemeinerten Spinleiter lautet dann

$$H_{Leiter} = J_{Holm} \sum_{i,j=1,2} \vec{S}_{i,j} \vec{S}_{i+1,j} + J_{Sprosse} \sum_i \vec{S}_{i,1} \vec{S}_{i,2} + J_{Diagonal} \sum_i \vec{S}_{i,1} \vec{S}_{i+1,2},$$

In dieser Arbeit wird das Phasendiagramm für die verallgemeinerte Spinleiter mit zwei gekoppelten Ketten vorgestellt. Dabei sind als Grenzfälle der $S=1$ HAFM, die dimerisierte Leiter, der $S=1/2$ HAFM und das Majumdar–Ghosh–Modell enthalten. Es werden Ergebnisse von Variationsrechnungen mittels Matrix–Produkt–Ansatz [35] vorgestellt sowie numerische Resultate aus exakten Diagonalisierungen. Dabei zeigen sich anhand von Untersuchungen der Anregungslücke und der Korrelationen starke Hinweise darauf, daß die dimerisierte Leiter, das Majumdar–Ghosh–Modell und die reguläre Spinleiter sowie der $S=1$ HAFM in derselben Phase liegen und die Anregungslücken in den verschiedenen Modellen Manifestationen desselben Quantenkondensationsphänomens sind. Weiterhin wird noch auf die in den Leitern zu beobachtenden Randeffekte eingegangen. Erste Ergebnisse sind in [36] veröffentlicht.

Ebenso wird der Übergang vom $S = 1/2$ HAFM zum Majumdar–Ghosh–Modell in dem Phasendiagramm untersucht. In unmittelbarer Nähe der Symmetrielinie zwischen HAFM und Majumdar–Ghosh–Modell, etwas oberhalb der kritischen Kopplungsstärke der übernächsten Nachbarn, ist auch CuGeO_3 einzuordnen. CuGeO_3 realisiert einen 1D $s = 1/2$ HAFM mit NNN–Kopplung. In theoretischer Hinsicht ist die Substanz aufgrund des Spin–Peierls–Phasenübergangs bei $T_{SP} = 14.3K$ interessant. In der Tieftemperatur–Spin–Peierls–Phase formen die Cu^{2+} –Ionen Dimere entlang der Kette und zeigen eine Tendenz zu Anregungen, die Verallgemeinerungen der Singlett–Triplet–Anregungen des dimerisierten Modells sind.

Für Temperaturen jenseits des Spin–Peierls Übergangs muß für eine konsistente Beschreibung der Suszeptibilitäten [37] eine zusätzliche antiferromagnetische Kopplung der übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden, wobei die Kopplungsstärken jedoch nicht unumstritten sind, ebenso wie die Stärke einer vorhandenen Alternierung auf den Sprossen und Diagonalen. Die Gitterstruktur gibt ebenfalls Hinweise auf eine solche zusätzliche Kopplung. CuGeO_3 besteht aus CuO_2 Ketten, die durch die Ränder der CuO_6 Oktaeder und durch Ge–Ionen getrennt sind. Wie von Mattheiss [38] beschrieben, ist es dem $O(2p)$ Orbital unmöglich, sich nach beiden angrenzenden Cu–Ionen auszurichten. Das Hüpfen zwischen den Sauerstoffionen entlang der Kette bewirkt einen Superaustausch über größere Entfernungen.

Aufgrund der frustrativen Effekte sind Quanten–Monte–Carlo Ergebnisse nur eingeschränkt verfügbar. Mittels eines numerischen Verfahrens [39] ist die spezifische Wärme und die Suszeptibilität berechnet worden. Der Vergleich mit dem Experiment soll Hinweise für die genauere Einordnung der Substanz in das Phasendiagramm der verallgemeinerten Spinleiter geben.

Ein weitergehendes Interesse an den Leitersubstanzen war durch die Hoffnung bestimmt, bei nur geringer Dotierung supraleitende Eigenschaften zu finden. Ein glücklicher Umstand dabei war, daß die Schwierigkeiten, die i. allg. bei der Dotierung von Übergangsmetalloxiden auftraten, bei Cupraten nicht vorhanden waren [34].

In der Haldankette trug die Untersuchung von Verunreinigungen sehr zum Verständnis des Systems bei. Die qualitativ vom AKLT–Modell vorhergesagten quasifreien $S=1/2$ Randspins wurden in ESR Experimenten an mit Cu dotiertem NENP [40] gefunden.

Aufgrund der Gemeinsamkeiten zwischen der $S=1/2$ Leiter und der Haldankette ist auch bei den Spinleitern der Effekt der Dotierung untersucht worden. Dabei sind sowohl Gemeinsamkeiten als auch Unterschiede zutage getreten.

Unterschiede zwischen den Modellen sind aufgrund der verschiedenen geometrischen Verhältnisse bei der Dotierung gegeben. Die in der Kette zum Bruch der magnetischen Anordnung führenden Störstellen erzeugen in der Leiter nur ein Gebiet abgeschwächter Kopplung. Gemeinsamkeiten mit dem Haldanefall erkennt man bei Betrachtung des der Verunreinigung gegenüberliegenden ungepaarten Spins. Er ist schwächer gebunden als seine Nachbarn und stellt das Pendant zum quasifreien Spin im Haldanefall dar.

Für eine statistische Behandlung der verunreinigten Spinleiter ist es nötig, eine statistische Verteilung der Störstellen vorauszusetzen. Die daraus resultierenden Konsequenzen für das thermodynamische Verhalten werden beschreiben. Weiterhin zeigen wir numerische Resultate aus exakten Diagonalisierungen und vergleichen sie mit DMRG–Rechnungen, die das Auffüllen des Leitergaps und das Verschwinden der Anregungslücke illustrieren sollen. Außerdem werden Effekte des lokalisierten Spins beschrieben, die die Darstellung durch ein effektives Modell stützen.

Ein weiteres Ziel bei der Untersuchung von Defekten in regulären Spinleitern war die Interpretation von Neutronenstreuexperimenten an $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [41, 42, 26]. Es ist eine starke, inelastische Resonanz bei 9 – 14meV beobachtet worden, die aufgrund der verschiedenen Gitterkonstanten der Ketten- und Leiterstruktur eindeutig von den Ketten herrührt. Die Anregungslücke entspricht dem von Suszeptibilitätsmessungen und ESR Experimenten vorausgesagten Wert und entsteht

über einem dimerisierten Zustand der Ketten. Dabei formen Cu-Ionen im Abstand von zwei und vier Plätzen Dimere. Eine weitere schwächere inelastische Resonanz bei 11meV ist den Leitern zuzuordnen. $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ besitzt, im Gegensatz zu den vorgestellten Cupraten, intrinsische magnetische Defekte aufgrund der enthaltenen Cu^{3+} -Ionen. Die Verunreinigungsdichte kann mittels Ersetzung des Strontiums durch Yttrium verringert und damit die Auswirkungen der Defektdichte auf die Anregungslücke in der Leiter studiert werden. Die Substitution durch Yttrium unterdrückt die in den Leitern beobachtete Resonanz. Dadurch verstärkt sich der Eindruck, daß die in den Leitern beobachtete Resonanz durch defektinduzierte Anregungszustände innerhalb des Leitergaps verursacht wird.

Der Tieftemperaturgrenzfall des statischen Strukturformfaktors wird mittels exakter Diagonalisierung für Systeme mit $N = 24$ Spins und verschiedenen Defekt-konfigurationen ermittelt. Dabei zeigt sich, daß der Wert der Anregungslücke und die defektinduzierten ferromagnetischen Korrelationen durch die numerischen Ergebnisse beschrieben werden können.

Kapitel 1

Die verallgemeinerte Spinleiter

1.1 Einleitung

Das hier vorgestellte Modell der verallgemeinerten Spinleiter besitzt nicht nur Kopplungen auf den Sprossen und Holmen, sondern auch auf den Diagonalen.

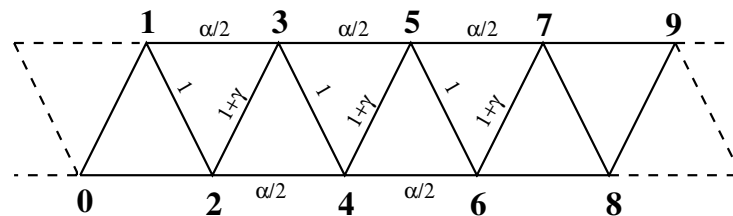


Abbildung 1.1: Verallgemeinerte Spinleiter

Die zusätzliche diagonale Kopplung, erstmalig von White [43] und Chitra et al. [44] vorgeschlagen, ermöglicht es, zwischen verschiedenen Grenzfällen, wie dem der $S = 1$ Haldanekette und des $S = 1/2$ HAFM, des dimerisierten Modells und des Majumdar–Ghosh–Modells zu interpolieren, ohne über den singulären Punkt zweier entkoppelter Ketten hinwegzugehen.

$$H = H^{(0)} + \frac{\alpha}{2}H^{(1)} + (1 + \gamma)H^{(2)} \quad (1.1)$$

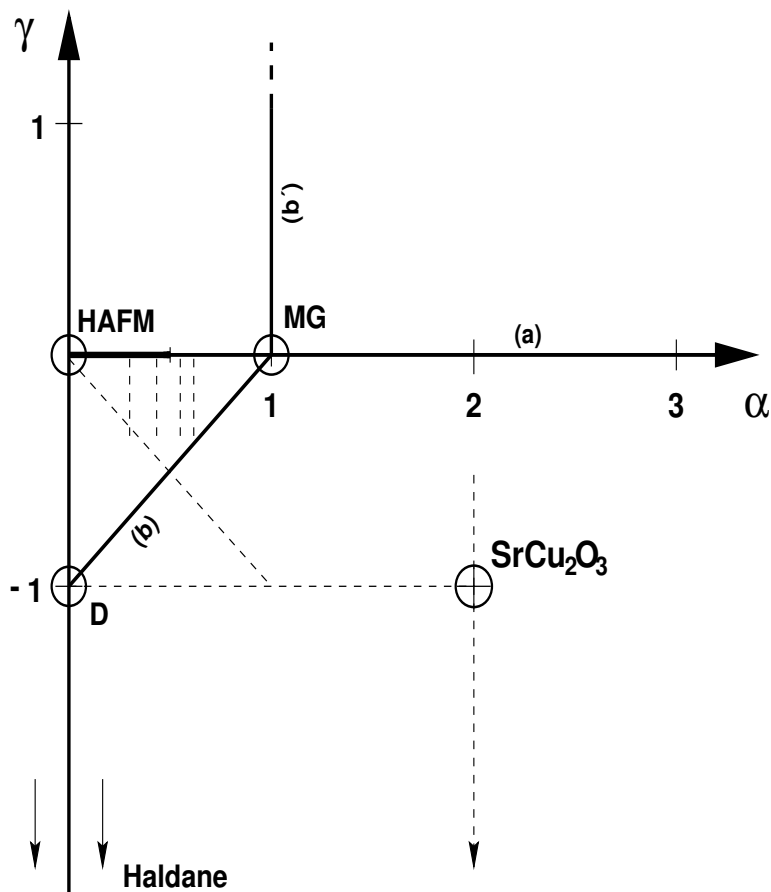


Abbildung 1.2: Phasendiagramm der verallgemeinerten Spinleiter

$$H^{(0)} = \sum_{j=1}^L \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j} \quad (1.2)$$

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^L \vec{S}_{i,j} \vec{S}_{i,j+1} \quad (1.3)$$

$$H^{(2)} = \sum_{j=1}^L \vec{S}_{1,j} \vec{S}_{2,j+1} \quad (1.4)$$

In dem hier diskutierten Phasendiagramm sind für alle Rechnungen periodische Randbedingungen (pbc) angenommen worden. $\vec{S}_{1,j}$ sind $s = 1/2$ Spinoperatoren, wobei der erste Index die Holme benennt und der zweite die Sprossen.

1.2 Grenzfälle und Pfade im Phasendiagramm

Der vorgestellte Hamiltonoperator enthält folgende wohlbekannte Grenzfälle:

- Den $S = 1/2$ HAFM mit zusätzlicher Wechselwirkung der übernächsten Nachbarn ($\gamma = 0$) und dort speziell das Majumdar–Ghosh–Modell [45] ($\gamma = 0, \alpha = 1$), von dem die beiden Grundzustände, Produkte aus Singletts auf den Sprossen bzw. Diagonalen, bekannt sind.
- Den $S = 1/2$ HAFM mit alternierender Wechselwirkung ($\alpha = 0$) und dort speziell das vollständig dimerisierte Modell ($\alpha = 0, \gamma = -1$). Dieses ist ein Produkt nicht wechselwirkender Zweizustandssysteme (Singlett, Triplet) mit einem Grundzustand, bestehend aus Singletts auf den Sprossen.
- Die reguläre ($S = 1/2$) antiferromagnetische (af) Spinleiter ($\alpha = 2, \gamma = -1$), der auch einige experimentelle Ergebnisse (SrCu_2O_3) zuzuordnen sind.
- Den $S = 1$ HAFM (Haldanekette) ($\gamma \rightarrow -\infty, |\alpha|/|\gamma| \ll 1$), der sich durch den Grenzübergang zu großen γ -Werten als effektives Modell mit Triplets auf den Diagonalen und einer effektiven Wechselwirkung $J_{eff} = \frac{1+\alpha}{4}$ ergibt.
- Den isotropen $S = 1/2$ HAFM ($\gamma = 0, \alpha = 0$) und zwei entkoppelte $S = 1/2$ HAFM mit der halben Anzahl Plätze ($\alpha \rightarrow \infty, |1 + \gamma|/|\alpha| \ll 1$).
- Von besonderem Interesse ist der Weg vom $S = 1/2$ HAFM ($\gamma = 0, \alpha = 0$) zum Majumdar–Ghosh–Modell ($\gamma = 0, \alpha = 1$) (a), in dessen Verlauf sich eine Energielücke bei $\alpha = \alpha_c$ öffnet. Dieser Übergang ist ausgiebig untersucht worden [20, 21, 18], und der zur Zeit genaueste Wert für die kritische Kopplung ist $\alpha_c = 2 \times 0.241156$ [19, 46].

Mit Hilfe der Bosonisierungstechnik (Luther + Peschel, Haldane) kann man diesen Übergang beschreiben. Nach der Einführung spinloser Fermionen mittels Jordan–Wigner–Transformation wird bei dem so erhaltenen fermionischen Hamiltonoperator der Kontinuumslikes durchgeführt, und es entsteht nach Bosonisierung eine 1+1 dimensionale Theorie freier masseloser Bosonen. Die Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn spielt hierbei die Rolle des entscheidenden Operators und sorgt bei Erreichen eines kritischen Wertes dafür, daß die Feldtheorie konform invariant wird. Als Folge fallen bei der Skalierung der Energielücke die logarithmischen

Korrekturen weg ($\Delta \sim 1/N$), und die niedrigsten Anregungen (Triplett, Singlett) entarten. Für $\alpha < \alpha_c$ hat das Singlett die höhere Energie, der Störoperator ist irrelevant, und das System zeigt das kritische Verhalten des $S = 1/2$ HAFM. Für $\alpha > \alpha_c$ ist der Operator relevant, und es öffnet sich eine Anregungslücke zwischen dem Grundzustand bzw. einem mit ihm im thermodynamischen Limes entartenden Singlett und dem Triplett. Das Verschwinden der Lücke zwischen dem Singlett und dem Triplett ist ein sehr guter Fitparameter zur Ermittlung der kritischen Kopplungsstärke. Problematisch ist in diesem Zusammenhang das Verhalten der Energielücke in der Nähe von α_c , da sie eine wesentliche Singularität der Form

$$\Delta \equiv e^{-\frac{A}{\alpha-\alpha_c}}$$

hat und numerisch erst bei $\alpha = 2 \times 0.3$ von Null zu unterscheiden ist.

Aus experimenteller Sicht ist dieser Pfad ebenfalls von Bedeutung aufgrund der Entdeckung der Spin–Peierls Substanz CuGeO_3 , die als quasi eindimensionale $s = 1/2$ Struktur vermutlich eine starke Kopplung zwischen den übernächsten Nachbarn aufweist [47].

- Ebenfalls von Interesse ist der Pfad, der das MG–Modell und Dimer–Modell verbindet (b). Auf dieser Linie sind der Grundzustand [48] und die niedrigste Anregung bei $k = \pi$ exakt bekannt [49].

Bei der Beschreibung des Phasendiagramms kann man sich auf die untere Halbebene beschränken, da es eine Symmetrietransformation gibt, die die obere Halbebene auf den Streifen $\gamma \in (0, -1)$ abbildet. Die Verschiebung des oberen Holmes um einen Gitterplatz nach links und Änderung der Kopplungskonstanten gemäß

$$\gamma \rightarrow \frac{-\gamma}{1+\gamma} \quad \alpha \rightarrow \frac{\alpha}{1+\gamma}$$

führt auf denselben Hamiltonoperator mit reskaliertener Energie $E \rightarrow \frac{E}{1+\gamma}$. Diese Transformation entspricht einer Vertauschung der Sprossen und Diagonalen.

Die Region $\gamma > -1$ hat nur antiferromagnetische Kopplungen und entspricht dem von Shastry und Sutherland [48] diskutierten Modell. Die Erweiterung auf Bereiche $\gamma \leq -1$ gibt die Möglichkeit, auch ferromagnetische Kopplungen zu betrachten, ist bisher aber nur für einige Spezialfällen durchgeführt worden [50, 44].

Bei der Untersuchung der verallgemeinerten Spinleiter werden Resultate aus Variationsrechnungen mittels Matrix-Produkt-(MP)-Ansatz den Ergebnissen aus exakten Diagonalisierungen gegenübergestellt. Eine zentrale Rolle spielt dabei das ursprünglich für den $S = 1$ HAFM [1] eingeführte Prinzip der versteckten Ordnung [51]. In dem dortigen Fall war es eine von Kennedy und Tasaki eingeführte nichtlokale unitäre Transformation, die diese Ordnung sichtbar machte. Durch das Hinzufügen eines biquadratischen Terms in den Hamiltonoperator, konnte dieser als Projektor geschrieben und der exakte Grundzustand konstruiert werden, ein Matrix-Produkt-Grundzustand mit perfekter verborgener Ordnung.

Eine Aufweichung des Haldanelimes in den Spinleitern führt zu einer Beimischung von Singlettzuständen auf den Diagonalen. Eine entsprechende Verallgemeinerung der Kennedy-Tasaki Transformation für die isotrope Spinleiter ist von Takada und Watanabe [52] vorgeschlagen worden ($\gamma = -1, \alpha \geq 0$). Explizite Definitionen der verborgenen Ordnung sind von Nishiyama et al. [53] und White [43] diskutiert worden.

Den Ausgangspunkt für eine Variationsrechnung mittels MP-Zuständen liefern die beiden Majumdar-Ghosh-Grundzustände. Da sie sich in Form von MP-Zuständen schreiben lassen, liegt es nahe, sie so zu verallgemeinern, daß im Haldanelimes als gute Näherung der Haldanegrundzustände die AKLT-Grundzustände [2] in der MP-Beschreibung nach Klümper et al. [54] erreicht werden.

Dadurch ist es durch kontinuierliche Variation der Parameter möglich, den Haldanefall mit dem MG-Modell und dem Dimer-Modell zu verbinden.

1.3 Matrix-Produkt-Zustände

Ein MP-Zustand ist allgemein gegeben durch

$$|\Omega\rangle = \prod_i g_i. \quad (1.5)$$

Dabei sind die g_i alle identisch. Die Einträge in den lokalen Matrizen g_i sind Linearkombinationen der Basiszustände der Elementarzelle. Die Dimension der Matrix ist problemabhängig. Bei VBS-Zuständen ist die Matrixdimension durch

$$D_M = (S + 1) \times (S + 1) \quad (1.6)$$

gegeben.

Man ist daran interessiert, als g_i Objekte mit definiertem Transformationsverhalten zu haben. Das bedeutet, den Matrizen g_i sollen ein fester Drehimpuls (j)

und eine feste Drehimpulsprojektion (m) zugeordnet werden können. Damit ist ihr Transformationsverhalten bezüglich der Matrixdarstellung der Rotationsgruppe gegeben durch

$$\hat{T}_R g^{j,m} \sim \sum_{m'} D_{m'm}^j(R) g^{j,m'}. \quad (1.7)$$

\sim bedeutet hier unitär äquivalent. Die Dimension der elementaren Matrizen sei $(N+1) \times (N+1)$.

Die $g^{j,m}$ sind ein Tensorprodukt aus Elementen des Spinraumes und aus Elementen des Matrixraumes. Eine Basis im Matrixraum ist gegeben durch $(N+1) \times (N+1)$ Matrizen $X^{k,q}$, $k = 0, \dots, N$, $q = -k, \dots, 0, \dots, k$, die sich auch gemäß der D^k Darstellung der Rotationsgruppe transformieren.

$$\hat{T}_R X^{k,q} \sim \sum_{q'} D_{q'q}^k(R) X^{k,q'}. \quad (1.8)$$

Weiterhin ist eine Basis der Spinzustände der Elementarzelle mit festen Drehimpulsquantenzahlen durch

$$|\psi_{\lambda,\mu}\rangle \quad \lambda = s \quad \mu = -s, \dots, 0, \dots, s \quad (1.9)$$

gegeben.

Die Konstruktion der Basis im Matrixraum beginnt mit der Festlegung von $(N+1) \times (N+1)$ Matrixdarstellungen der Operatoren s^+ , s^- , s^z , die die Vertauschungsregeln der $SU(2)$ erfüllen.

$$[s^+, s^-] = 2s^z \quad [s^z, s^\pm] = \pm s^\pm \quad (1.10)$$

Weiterhin gilt für die Drehimpulsoperatoren s^+ , s^- , s^z der $2k+1$ dimensionalen Darstellung

$$S^z |k, q\rangle = q |k, q\rangle \quad (1.11)$$

$$S^\pm |k, q\rangle = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} |k, q \pm 1\rangle. \quad (1.12)$$

Sei nun $|k, 0\rangle = X^{k,0} = p_k s^z$ mit dem Vorfaktor p_k als Normierungsbedingung. Dann ergibt sich mit 1.12 eine Bedingung für die sukzessive Konstruktion der Matrizen $X^{k,q}$. Es gilt

$$S^+ |k, 0\rangle = \sqrt{k(k+1)} |k, 1\rangle, \quad (1.13)$$

dann folgt mit $|k, 0\rangle = X^{k,0}$ gemäß der Algebra

$$[s^+, X^{k,0}] = [s^+, p_k s^z] = -p_k s^+ \quad (1.14)$$

und durch Identifikation mit 1.13

$$|k, 1\rangle = X^{k,1} = -\frac{1}{\sqrt{2k(k+1)}} p_k s^+. \quad (1.15)$$

Die Konstruktion der Zustände $X^{k,-1}$ verläuft analog.

Das Tensorprodukt von $X^{k,q}$ mit $|\psi_{\lambda,\mu}\rangle$ ist nun einfach durch $X^{k,q} \otimes |\psi_{\lambda,\mu}\rangle$ gegeben. Dies ist zwar eine Basis im Produktraum, aber die Produktzustände haben noch kein definiertes Transformationsverhalten bezüglich der Rotationsgruppe. Wie jedoch Objekte mit festem Quantenzahlen (j,m) im Produktraum aus den einzelnen Räumen konstruiert werden, ist von der quantenmechanischen Addition von Drehimpulsen her bekannt.

$$g^{j,m} = \sum_{k,\lambda} c_j^{k,\lambda} \sum_{q,\mu} \langle jm|kq, \lambda\mu\rangle X^{k,q} |\psi_{\lambda,\mu}\rangle \quad (1.16)$$

Dabei sind die $\langle jm|kq, \lambda\mu\rangle$ die bekannten Clebsch–Gordon Koeffizienten. Das nun noch verbleibende Problem ist die Konstruktion eines Produktzustandes aus den $g^{j,m}$ mit ebenfalls definiertem Transformationsverhalten. Im allgemeinen ist der Produktzustand G definiert durch

$$G = g_1^{j,m} \otimes g_2^{j,m} \otimes \dots \otimes g_N^{j,m}. \quad (1.17)$$

Das Wigner–Eckart Theorem erlaubt es nun, vom Tensorprodukt zum Tensorprodukt des Spinraums allein und einer Matrizenmultiplikation im Matrixraum überzugehen und Zustände mit definiertem Transformationsverhalten zu konstruieren. Dabei ist aber zu beachten, daß diese Konstruktion nur für Zustände $g^{j,m}$ höchsten (niedrigsten) Gewichtes (j=m (-m)) durchführbar ist.

$$G^{J,M} = g_1^{j,j} g_2^{j,j} \dots g_N^{j,j} \quad \text{mit } J = Lj \quad M = Lj \quad (1.18)$$

Zustände mit $M < Lj$ sind durch Anwendung des Operators S_{tot}^- zu erreichen.

1.3.1 Formulierung des Ansatzes

Als Beispiel für die Vorgehensweise bei der Konstruktion eines MP–Zustandes soll die isotrope, eindimensionale $S = 1$ Kette betrachtet werden. Die Elementarzelle besitzt einen ($S = 1$) Spin. Der Satz von Basiszuständen besteht somit aus

$$X^{1,1} \quad X^{1,0} \quad X^{1,-1}, \quad (1.19)$$

Im einfachsten Fall ($N=1$) sind die Operatoren s^+ , s^- , s^z die Spinmatrizen zu $S = 1/2$. Sei $X^{1,0} = 2s^z$ dann folgt mit

$$S^+|1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, 1\rangle \quad (1.20)$$

$$[s^+, X^{1,0}] = 2[s^+, s^z] = -2s^+ \quad (1.21)$$

$$X^{1,1} = -\sqrt{2}s^+ \quad (1.22)$$

und mit

$$S^-|1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, -1\rangle \quad (1.23)$$

$$[s^-, X^{1,0}] = 2[s^-, s^z] = 2s^- \quad (1.24)$$

$$X^{1,-1} = \sqrt{2}s^- \quad (1.25)$$

Die Basis im Matrixraum ist folglich gegeben durch

$$X^{1,0} = 2s^z \quad X^{1,1} = -\sqrt{2}s^+ \quad X^{1,-1} = \sqrt{2}s^- \quad (1.26)$$

Es ergibt sich für $g^{0,0}$

$$g_{AKLT}^{0,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} [(X^{1,1})^\dagger|1, -1\rangle + (X^{1,-1})^\dagger|1, 1\rangle - (X^{1,0})^\dagger|1, 0\rangle] \quad (1.27)$$

Die explizite Matrixdarstellung der $SU(2)$ ist bis auf eine unitäre Transformation festgelegt. Um die bekannte Matrix g_i^{AKLT} des AKLT-Falls zu erhalten, ist eine spezielle Wahl der Generatoren erforderlich.

$$s^z = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

$$s^+ = -\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

$$s^- = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

Die unitäre Transformation, die die übliche Matrixdarstellung mit der obigen verbindet ist

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad UU^\dagger = 1.$$

Welche Wahl man für die Matrixdarstellung trifft, ist vollkommen unerheblich, da die Spur invariant unter einer unitären Transformation ist.

In der verallgemeinerten Spinleiter besteht die Elementarzelle aus zwei ($S = 1/2$) Spins. Demzufolge führt die Ergänzung der Basiszustände des AKLT-Modells durch $X^{0,0} = \mathbf{1}$ zu einer Basis und die Matrix g_j lautet

$$g_{Leiter}^{0,0} = c_0^{0,0} \mathbf{1}|s\rangle + c_0^{1,1} g_{AKLT} \quad (1.31)$$

Welches Spinpaar die Elementarzelle bildet, ist wählbar: entweder das auf der Diagonalen oder das auf der Sprosse. Da wir uns hier auf die Betrachtung der unteren Halbebene beschränken, ist das Diagonalpaar das zu wählende, da nur dieses im Haldanegrenzfall auf die AKLT-Grundzustände führt. Damit lautet der MP-Zustand für die Spinleiter

$$G_{Leiter} = Tr \prod_{j=1}^L g_j \quad \text{mit} \quad g_j = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_j + b|s\rangle_j & -a\sqrt{2}|t_+\rangle \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle & b|s\rangle_j - a|t_0\rangle \end{pmatrix}. \quad (1.32)$$

Betrachten wir zuerst den Majumdar–Ghosh–Grenzfall. Unter der Annahme periodischer Randbedingungen sind die beiden Grundzustände als Produkte von Singletts auf den Sprossen $|s_r\rangle$ bzw. auf den Diagonalen $|s_d\rangle$ bekannt. Sie sind Matrixproduktzustände und durch den vorgestellten Ansatz exakt zu beschreiben.

$$a = 0 \quad \longrightarrow \quad |0_d\rangle = \prod_{j=1}^L |s_d\rangle \quad (1.33)$$

$$a = b = 1/2 \quad \longrightarrow \quad |0_r\rangle = Tr \prod_{j=1}^L g_j \quad (1.34)$$

Die Symmetrietransformation vertauscht die Grundzustände. Sie bleiben auf der Symmetrielinie entartet, sind jedoch nur am Majumdar–Ghosh–Punkt Grundzustände und Eigenzustände. Eine endliche Alternierungsstärke γ hebt die Entartung auf. Auf der Linie $(\alpha, \gamma) : (0, -1) \rightarrow (1, 0)$ (Disorder line) bleibt der Zustand $|0_d\rangle$ als Grundzustand erhalten, und man kann die Linie durch das Verschwinden der Korrelationslänge charakterisieren. Der Zustand $|0_r\rangle$ wächst dort makroskopisch im Spektrum.

Die Betrachtung der Majumdar–Ghosh–Grundzustände erlaubt einen Blick auf die von White [43] und Frischmuth et al. [55] eingeführte verborgene Ordnung.

$$T_{Leiter}(i-j) = -\langle (S_{1,i}^z + S_{2,i+1}^z) \exp^{i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} (S_{1,l}^z + S_{2,l+1}^z)} (S_{1,j}^z + S_{2,j+1}^z) \rangle. \quad (1.35)$$

Im Fall $a = b$ besitzen die Komponenten des Grundzustandes eine Struktur der Form

$$t_+ t_- t_+ t_- (t_0 + s)(t_0 + s) \dots (t_0 + s)(t_0 + s) t_+ t_- t_+ t_- t_+ (t_0 - s)(t_0 - s) \dots (t_0 - s)(t_0 - s) t_- t_+ t_- t_+ \dots \quad (1.36)$$

Es gibt zwei verschiedene $S_z = 0$ Zustände $(t_0 + s, t_0 - s)$. Die verborgene Ordnung beschreibt eine Neélordnung, in der sich t_+ und t_- abwechseln und ihre Abfolge nur durch Strings aus Nullprojektionen einer der beiden Arten unterbrochen wird. Wobei auf t_+ nur ein t_- oder ein $(t_0 + s)$ und auf t_- nur ein t_+ oder ein $(t_0 - s)$ folgen kann. Für $a = 0$ wird die verborgene Ordnung trivial. Der Grundzustand besitzt dann die Form

$$s \ s \ s \ s \ s \ \dots \ s \ s \ s \ s \ s \quad (1.37)$$

und ist ein perfekter Singlettkristall.

Im Grenzfall $\gamma \rightarrow -\infty$ und damit verschwindendem Singlettbeitrag auf den Diagonalen geht der MP-Zustand $|0_a\rangle$ in den AKLT-Zustand über und der Ordnungsparameter wird zum Stringordnungsparameter des S=1 HAFM [43].

Der vorliegende MP-Ansatz kann auf den von Takada und Watanabe [52] reduziert werden, wenn man deren Zustand im ursprünglichen Spinraum betrachtet und perfekte verborgene Ordnung annimmt.

Ein weiterer interessanter Fall ist die Wahl verschiedener Parameter an unterschiedlichen Plätzen. Das Transformationsverhalten hängt nur von den Quantenzahlen der lokalen g -Matrizen ab und nicht von der Wahl der Parameter a, b . Als Beispiel sei hier die Wahl

$$\begin{aligned} g_{2i}^{0,0} &:= g_{2i}^+ \\ g_{2i-1}^{0,0} &:= g_{2i-1}^- \\ g_j^\pm &= g_j(a = 1, b = \pm 1) \end{aligned} \quad (1.38)$$

Der so erhaltene MP-Zustand entspricht dem in [56, 57] eingeführten RVB-Ansatz mit Singletts auf den Holmen.

Die Ansatzwellenfunktion ist genügend allgemein, um äußerst verschiedenartige Modelle gut zu beschreiben. Enthalten sind unkorrelierte Zustände (Dimer-Modell) ebenso wie hochkorrelierte Zustände (AKLT-Modell). Andererseits gibt es Regionen des Phasenraums, die nicht durch den obigen Ansatz zu beschreiben sind (kritische Linie vom HAFM zum konformen Punkt). Ganz allgemein kann man nicht erwarten, daß Zustände mit nicht exponentiellem Verhalten der Korrelationsfunktionen beschrieben werden können.

1.3.2 Variationsrechnung für die Energie

Die Variationrechnung zur Ermittlung des Grundzustandes wird entsprechend der des Haldanefalls durchgeführt.

$$\frac{\langle G^{0,0} | H | G^{0,0} \rangle}{\langle G^{0,0} | G^{0,0} \rangle} = \frac{E_{var}}{N} \quad (1.39)$$

mit

$$|G^{0,0}\rangle = Tr \prod_{i=1}^N g_j \quad g_j = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_j + b|s\rangle_j & -a\sqrt{2}|t_+\rangle \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle & b|s\rangle_j - a|t_0\rangle \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

Die Normierung des MP-Zustandes stellt eine Bedingung an die Variationsparameter a, b in der Form (Anhang A)

$$3|a^2| + |b^2| = 1. \quad (1.41)$$

Es ergibt sich als Variationsenergie (Anhang B)

$$\begin{aligned} \frac{E_{var}}{N} = & - 3(A^4 + 2A^3 \cos \phi + A^2 B^2 \cos^2 \phi) \\ & - 3\alpha (A^4 - A^2 B^2 \cos^2 \phi) + \frac{3}{4}(1 + \gamma) (A^2 - B^2) \end{aligned} \quad (1.42)$$

$$A = |a| \quad B = |b|.$$

Darin sind die beiden Spezialfälle von Watanabe ($\gamma = -1$) [50] und Takada und Watanabe [52] ($\gamma \rightarrow -\infty, \alpha \sim (1 + \gamma)$) enthalten.

Zur Variation der Energie führt man zweckmäßigerweise den neuen Parameter $u = B/A$ ein und minimiert zuerst nach $\cos \phi$. Daraufhin erhält man eine Gleichung dritter Ordnung für u und kann so die Variationsparameter A, B als Funktion der Leiterparameter α, γ bestimmen [36].

$$E_{var}/N = 3 \frac{1+u}{3+u^2} \left(\frac{1}{4}(1+\gamma)(1-u) - \frac{1+u}{3+u^2} - \alpha \frac{1-u}{3+u^2} \right) \quad (1.43)$$

1.3.3 Korrelationen

Die einfache Struktur der MP-Zustände erlaubt die Berechnung der Korrelationslänge. Aufgrund der Isotropie des Modell existiert nur eine Korrelationslänge

$$\xi_{long}^{-1} = \xi_{trans}^{-1} = \ln \left(\frac{1}{|1 - 4A^2|} \right)$$

Zur Untersuchung der verborgenen Ordnung ist der Ordnungsparameter berechnet worden und reproduziert die bekannten Ergebnisse des Haldanegrenzfalls [58]. Im thermodynamischen Limes ergibt sich [36]

$$\begin{aligned} |T(j-i)| &= \left| \langle (S_{1,i}^z + S_{2,i+1}^z) e^{i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} (S_{1,l}^z + S_{2,l+1}^z)} (S_{1,j}^z + S_{2,j+1}^z) \rangle \right| \\ &= \frac{4}{9} (1 - B^2)^2 \end{aligned} \quad (1.44)$$

1.3.4 Anregungen

Die Formulierung der Anregungen erfolgt analog derjenigen im Haldanefall [59, 60]. Dort geht man vom AKLT-Modell aus, in dem die Grundzustandswellenfunktion

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{VBS} = \psi_{\alpha i_1} \epsilon^{i_1 i_2} \psi_{i_2 i_3} \epsilon^{i_3 i_4} \dots \epsilon^{i_{N-1} i_N} \psi_{i_N \beta} \quad (1.45)$$

lautet. Unter der Annahme periodischer Randbedingungen ergibt sich

$$\Omega_{pbc}^{VBS} = \epsilon^{\beta\alpha} \psi_{\alpha i_1} \epsilon^{i_1 i_2} \psi_{i_2 i_3} \epsilon^{i_3 i_4} \dots \epsilon^{i_{N-1} i_N} \psi_{i_N \beta} \quad (1.46)$$

mit

$$\begin{aligned} \psi_{11} &= \sqrt{2} |-\rangle = \sqrt{2} |\downarrow\downarrow\rangle \\ \psi_{22} &= \sqrt{2} |+\rangle = \sqrt{2} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \psi_{12} &= \psi_{21} = |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow\rangle \end{aligned} \quad (1.47)$$

und

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

wobei $(+, -, 0)$ die z-Projektion des $S = 1$ Spins und \downarrow, \uparrow die des $S = 1/2$ Spins sind.

Die Anregungen werden durch Symmetrisierung eines beliebigen Valence-Bonds erzeugt [59, 60].

$$\epsilon^{(i)} \longrightarrow \begin{cases} \delta_{1,0}^{(i)} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \delta_{1,-1}^{(i)} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \delta_{1,1}^{(i)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (1.49)$$

Der angeregte Zustand lautet (pbc,i=1):

$$|EXC\rangle_{pbc}^{VBS}(1) = \delta^{\beta\alpha} \psi_{\alpha i_1} \epsilon^{i_1 i_2} \psi_{i_2 i_3} \epsilon^{i_3 i_4} \dots \epsilon^{i_{N-1} i_N} \psi_{i_N \beta} \quad (1.50)$$

oder

$$|EXC\rangle_{pbc}^{VBS}(1) = Tr \left[\delta^{\beta\alpha} \psi_{\alpha i_1} \epsilon^{i_1 i_2} \psi_{i_2 i_3} \epsilon^{i_3 i_4} \dots \epsilon^{i_{N-1} i_N} \psi_{i_N \beta} \right]. \quad (1.51)$$

Um den Zusammenhang zwischen der obigen Formulierung und der MP-Formulierung herzustellen, verwendet man die Matrixdarstellung der AKLT-Wellenfunktion.

$$\Omega_{VBS}^{pbc} = Tr \left[\epsilon^1 \psi^1 \epsilon^2 \psi^2 \dots \epsilon^N \psi^N \right] \quad (1.52)$$

mit

$$\epsilon^i \psi^i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^i \begin{pmatrix} \sqrt{2}|- \rangle & |0 \rangle \\ |0 \rangle & \sqrt{2}|+ \rangle \end{pmatrix}^i = \begin{pmatrix} |0 \rangle & \sqrt{2}|+ \rangle \\ -\sqrt{2}|- \rangle & -|0 \rangle \end{pmatrix}^i = \tilde{g}_{AKLT}^i \quad (1.53)$$

Diese Matrix unterscheidet sich von der in 1.32 konstruierten durch eine unitäre Transformation $U = \sigma^z$ und $b = 0$.

$$U \tilde{g}_{AKLT}^i U^\dagger = g_{AKLT}^i \quad (1.54)$$

Das bedeutet, daß bei der Konstruktion der Basis der verwendeten 2×2 Matrizen eine andere Darstellung der Spinmatrizen gewählt wurde, eben diejenige, die aus der in Gln. 1.28 - 1.30 benutzten durch die obige unitäre Transformation entsteht.

$$U s^z U^\dagger = \tilde{s}^z = s^z \quad (1.55)$$

$$U s^+ U^\dagger = \tilde{s}^+ = -s^+ \quad (1.56)$$

$$U s^- U^\dagger = \tilde{s}^- = -s^- \quad (1.57)$$

Der MP-Zustand ist aufgrund der Spurbildung invariant bezüglich einer unitären Transformation.

$$\Omega_{AKLT}^{pbc} = Tr \left[\prod_{i=1}^N \tilde{g}_{AKLT}^i \right] = Tr \left[\prod_{i=1}^N g_{AKLT}^i \right] \quad (1.58)$$

Die Formulierung der Anregung in Matrixschreibweise folgt analog:

$$|EXC\rangle_{AKLT}^{pbc}(1) = Tr \left[\delta^1 \psi^1 \epsilon^2 \psi^2 \dots \epsilon^N \psi^N \right] \quad (1.59)$$

Es gilt mit der in Gleichung 1.55 - 57 eingeführten Darstellung der Spinmatrizen

$$\tilde{s}_i^z \epsilon^i = -\frac{1}{2} \delta_{1,0}^{(i)}, \quad (1.60)$$

$$\tilde{s}_i^+ \epsilon^i = \delta_{1,1}^{(i)}, \quad (1.61)$$

$$\tilde{s}_i^- \epsilon^i = 2\delta_{1,-1}^{(i)}. \quad (1.62)$$

Es folgt damit für die Anregung

$$|EXC\rangle_{AKLT}^{pbc}(1) = Tr \left[\tilde{s}_1^{z,\pm} \epsilon^1 \psi^1 \epsilon^2 \psi^2 \dots \epsilon^N \psi^N \right] \quad (1.63)$$

bzw. in MP-Formulierung

$$|EXC\rangle_{AKLT}^{pbc}(1) = Tr \left[s_i^{z,\pm} g_{AKLT}^1 \prod_{i=2}^N g_{AKLT}^i \right]. \quad (1.64)$$

In Teil E des Anhangs wird gezeigt, daß die so erzeugten Matrizen

$$2s_i^z g_{AKLT}^{0,0} = g_{AKLT}^{1,0} \quad (1.65)$$

$$s_i^+ g_{AKLT}^{0,0} = g_{AKLT}^{1,1} \quad (1.66)$$

$$s_i^- g_{AKLT}^{0,0} = g_{AKLT}^{1,-1} \quad (1.67)$$

tatsächlich den Komponenten eines Triplets entsprechen.

Die Forderung nach Translationsinvarianz wird befriedigt durch die Fouriertransformierte der Anregung.

$$|EXC\rangle_{AKLT}^{pbc}(k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} Tr \left[\prod_{i=1}^{n-1} g_{AKLT}^i 2s_n^{z,\pm} g_{AKLT}^n \prod_{j=n+1}^N g_{AKLT}^j \right] \quad (1.68)$$

Davon ausgehend lautet der Ansatz für eine Anregung in der verallgemeinerten Spinleiter

$$|\psi(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} Tr \left[\prod_{i=1}^{n-1} g^i 2s_n^z g^n \prod_{j=n+1}^N g^j \right] \quad (1.69)$$

mit

$$g_j = \begin{pmatrix} b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix}$$

Berechnet wird die Differenz des Erwartungswert des Hamiltonoperators und der Grundzustandsenergie (Anhang C,D).

$$\frac{\langle \psi(k) | H - E_0 | \psi(k) \rangle}{\langle \psi(k) | \psi(k) \rangle} = \Delta(k) \quad (1.70)$$

Die Resultate sind für die unterschiedlichen Bonds separat angegeben. Dabei sind die entsprechenden Grundzustandsanteile bereits subtrahiert worden.

$$\begin{aligned} H - E_0 &= H^{(0)} + \frac{\alpha}{2} H^{(1)} + (1 + \gamma) H^{(2)} - E_0 \\ &= \tilde{H}^{(0)} + \frac{\alpha}{2} \tilde{H}^{(1)} + (1 + \gamma) \tilde{H}^{(2)}. \end{aligned} \quad (1.71)$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle \psi(k) | \tilde{H}^{(0)} | \psi(k) \rangle}{\langle \psi(k) | \psi(k) \rangle} &= \Delta^{(0)}(k) \\ &= \frac{4a^2(a+b)^2}{1-x^2} \lambda_k + \frac{2a^2}{[1-x^2]\lambda_k} [(-2(1+3x^2)(a^2+b^2) \\ &\quad + 4(x^2+ab(1-3x^2))) \cos^2(k) + 2x((1+3x^2)(4ab-1) \\ &\quad + 2(b^2+a^2)(3x^2+2)) \cos(k) + 2x^2(1+x^2) \\ &\quad + (a^2+b^2)(1-10x^2-3x^4) - 2ab(1+8x^2+3x^4)] \end{aligned} \quad (1.72)$$

$$\begin{aligned} \frac{\langle \psi(k) | \tilde{H}^{(1)} | \psi(k) \rangle}{\langle \psi(k) | \psi(k) \rangle} &= \Delta^{(1)}(k) \\ &= \frac{-8a^2x}{1-x^2} \lambda_k - \frac{4a^2}{(1-x^2)\lambda_k} [\\ &\quad 2x(2(a^2+b^2)-3x^2-1) \cos^2(k) \\ &\quad + 2(2x^2(2+3x^2)-(a^2+b^2)(1+3x^2)) \cos(k) \\ &\quad + x(2(a^2+b^2)(1+x^2)+1-3x^4-10x^2)] \end{aligned} \quad (1.73)$$

$$\frac{\langle \psi(k) | \tilde{H}^{(2)} | \psi(k) \rangle}{\langle \psi(k) | \psi(k) \rangle} = \Delta^{(2)}(k) \quad (1.74)$$

$$= \frac{-b^2}{1-2a^2} \frac{(1+x^2) \cos(k) - 2x}{\lambda_k} \quad (1.75)$$

mit

$$\lambda_k = 1 + x^2 - 2x \cos(k) \quad \text{und} \quad x = b^2 - a^2 \quad (1.76)$$

1.4 Numerische Verfahren

Das beschriebene Variationsverfahren liefert Ergebnisse, die in wenigen Spezialfällen mit exakten Werten verglichen werden können. Exakte Lösungen sind wichtig zur Beurteilung der Güte von analytischen Näherungsverfahren. Jedoch gibt es gerade bei dem hier vorgestellten Modell nur wenige Punkte, an denen die MP-Resultate exakten Lösungen gegenübergestellt werden können, insbesondere exakte niedrige Anregungszustände sind fast nicht vorhanden.

Aus diesem Grund ist es hilfreich, die analytischen Ergebnisse mit numerischen Resultaten zu vergleichen und damit den Gültigkeitsbereich der Näherung bzw. der entscheidenden physikalischen Mechanismen zu beurteilen. In dem hier vorliegenden Fall der verallgemeinerten Spinleiter ist das Verfahren der exakten Diagonalisierung (ED) von endlichen Systemen mit anschließender Extrapolation zum thermodynamischen Limes benutzt worden.

Die exakte Diagonalisierung eines quantenmechanischen Systems ist prinzipiell sehr einfach. Es existieren ein endliches System aus N quantenmechanischen Objekten und ein hermitescher Hamiltonoperator, der auf diesem System operiert. Der Hilbertraum des Hamiltonoperators soll endlich sein und die Dimension d_H haben. Dann kann man den Hamiltonoperator durch seine Wirkung auf eine Basis des Hilbertraumes charakterisieren, d.h., ihn als hermitesche $d_H \times d_H$ Matrix darstellen. Das Spektrum des Hamiltonoperators und die zugehörigen Eigenfunktionen erhält man durch Diagonalisierung der Hamiltonschen Matrix.

Als Beispiel sei hier ein System aus N quantenmechanischen Spins der Länge S auf einem Ring gewählt. Der Hamiltonoperator sei isotrop und habe die Form

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad i, j : \text{nächste Nachbarn.} \quad (1.77)$$

Der Hilbertraum hat die Dimension $d_H = (2S + 1)^N$ und die Hamiltonsche Matrix die Dimension $d_H \times d_H = (2S + 1)^N \times (2S + 1)^N$.

Der Zeitaufwand für die Diagonalisierung einer Matrix der Dimension $M \times M$ sei T_D und der Speicherbedarf R_D . Routinen zur Diagonalisierung von Matrizen sind überall verfügbar und leicht zu verwenden. Diese Routinen haben einen Zeit- und Speicherbedarf, der proportional zum Quadrat der Matrixdimension ist.

$$T_D \sim M^2 \quad R_D \sim M^2 \quad (1.78)$$

Praktikabel erweisen sich derartige Routinen nur für Matrizen bis Dimensionen $M = 1000$. Woraus bei einer einfachen Kette ohne Ausnutzung jedweder Symmetrie, d.h. Blockbildung der Hamiltonschen Matrix, folgt

Definiert man außerdem noch einen Satz von $m \times j$ Matrizen V_j mit

$$V_j \equiv \{v_1, v_2, \dots, v_j\},$$

und sei e_j der normierte Koordinatenvektor, dessen j -te Komponente einzig von Null verschieden ist, so ist es möglich, die Rekursionsformel in Matrixdarstellung zu formulieren.

$$HV_j = V_j T_j + \beta_{j+1} v_{j+1} e_j^T \quad (1.82)$$

Weiterhin ist es möglich, zu jedem (Eigenvektor, Eigenwert) Paar (u, μ) von T_m einen korrespondierenden Ritzvektor $y \in \mathbb{R}^n$ gemäß

$$y \equiv V_m u(\mu) \quad (1.83)$$

zu konstruieren. Die Eigenwerte der Lanczos–Matrizen werden Ritzwerte der korrespondierenden H-Matrix genannt und die obigen aus den Eigenvektoren konstruierten Vektoren Ritzvektoren von H. Im allgemeinen wird nicht jeder Eigenwert der Lanczos–Matrix eine gute Näherung eines Eigenwertes von H sein. Eine äußerst brauchbare Hilfe zur Beurteilung der Güte eines Eigenwertes liefert die Größe ϵ_μ

$$\epsilon_\mu \sim |\beta_{m+1} u_m(\mu)|, \quad (1.84)$$

wobei $u_m(\mu)$ die letzte Komponente des entsprechenden Eigenvektors der Tridiagonalmatrix T_m ist.

Realisierung der Prozedur

Der Vorteil der Lanczos–Routine besteht in der extremen Verringerung des Speicher- und Zeitbedarfs.

Die Diagonalisierung der Hamiltonschen Matrix benötigt den Speicherplatz für die $n \times n$ Einträge. Im vorliegenden Fall eines Spinsystems, bestehend aus N Spins der Länge $1/2$, gilt $n = 2^N$. Das Lanczos–Verfahren hat nun den Vorteil, daß man die Hamiltonsche Matrix nicht abspeichern muß, und einfach die Wirkung des Hamiltonoperators auf einen Basisvektor benutzt. Damit reduziert sich der Speicherbedarf von $2n^2 + 4n$ auf $4n$ (zwei komplexe Lanczos–Vektoren) und ist so linear in der Basisdimension. Der Zeitbedarf ist ebenfalls reduziert und, so weit man an den wenigen niedrigen Zuständen interessiert ist, nur noch linear in n .

Prinzipiell ist es möglich, das gesamte Spektrum des Hamiltonoperators zu erzeugen. Dann steigt der Zeitbedarf jedoch wieder wie $n \times n$, da die Hamiltonsche Matrix nicht gespeichert wird, sondern in jedem Lanczos–Schritt berechnet

werden muß. Dazu benötigt man eine Vorschrift, gemäß der der Hamiltonoperator auf einen Basiszustand wirkt, und eine vollständige, orthonormale Basis.

Es gibt Fälle, in denen die Anzahl der Matrixeinträge nur proportional zu n ist. Diese Matrizen heißen "sparse". Bei ihnen kann sich die Speicherung der gesamten Einträge als sinnvoll erweisen. Welches Vorgehen zu wählen ist, ist dahingehend zu entscheiden, ob laufzeitoptimiert oder speicheroptimiert gearbeitet werden soll.

Durch das Ausnutzen der Symmetrien des Hamiltonoperators ist es möglich, die Basiszustände so zu wählen, daß die Hamiltonsche Matrix blockdiagonal ist. Daraufhin kann man das System in den verschiedenen Unterräumen separat diagonalisieren und benötigt dort eine deutlich geringere Basisdimension. Natürlich ist die Hamiltonsche Matrix in jedem Unterraum zu diagonalisieren, und daher sind so viele Programmläufe wie Unterräume notwendig.

Das zentrale Problem besteht nun in der Ausnutzung der Symmetrien zur Erzeugung möglichst vieler und möglichst kleiner Unterräume.

In dem hier vorliegenden Fall ist der Hamiltonoperator invariant gegenüber den Erzeugenden zweier Symmetriegruppen, der $SU(2)$ und der Translationsgruppe. Ausgenutzt wird hier nur letztere und die Erhaltung der Projektion des Gesamtspins in z -Richtung. Die Ausnutzung der gesamten $SU(2)$ Invarianz würde die Dimension der einzelnen Unterräume zwar noch ein wenig reduzieren, aber die zusätzliche Komplexität der Basiserzeugung brächte eine Verlangsamung des Programmablaufs, die den Speichervorteil nahezu aufhebe.

Eine typische Konfiguration des vorliegenden Systems sei gegeben durch die Angabe der z -Projektionen der Spins. Eine Kodierung einer derartigen Konfiguration ist durch eine N stellige $(2s + 1)$ -adische Zahl gegeben.

$$\begin{array}{llllll}
 \text{Konf.:} & (S) & (S - 4) & \dots & (-S) & \\
 \text{Platz:} & 0 & 1 & \dots & N - 1 & (1.85) \\
 \text{Zahl:} & (2S)(2S + 1)^0 & (2S - 4)(2S + 1)^1 & \dots & (0)(2S + 1)^{N-1} &
 \end{array}$$

Die Dimension der Basis ist $(2S + 1)^N$. Man benötigt also eine Liste der Größe $(2S + 1)^N$, in der zu jeder Zahl eine entsprechende Konfiguration als p -adische Zahl festgehalten ist. Ebenso benötigt man eine inverse Liste derselben Größe, in der zu jeder p -adischen Zahl die Nummer des Zustandes vermerkt ist.

Die Ausnutzung der Symmetrien teilt die Basis in verschiedene nicht wechselwirkende Unterräume auf. Die Dimension einer solchen Unterraumbasis $d_{Stot,k}$

hängt nun von den vorgegeben Quantenzahlen (S_{tot}^z, k) ab. Für den hier vorliegenden Fall ($S=1/2$) bedeutet das:

$$d_{S_{tot},k} \approx 1/N \binom{N}{N/2 - S_{tot}^z}. \quad (1.86)$$

Die Dimension der verschiedenen k -Unterräume ist natürlich nur annähernd identisch und muß explizit im Programm berechnet werden. Ein Basiszustand hat dann die folgende Gestalt

$$|\Psi, S_{tot}^z\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{ikn} T^n R[\psi(S_{tot}^z)], \quad (1.87)$$

T ist der Translationsoperator, der um eine Einheitszelle verschiebt, und $R[\psi(S_{tot}^z)]$ ist ein Repräsentant des Unterraumes, im folgenden Orbit genannt, der durch die wiederholte Anwendung des Translationsoperators auf einen einzelnen Zustand erzeugt wird. Als Repräsentant werden wir den Zustand wählen, der als Zahl interpretiert, minimal ist.

Damit schrumpft die Dimension der Basisliste auf die Anzahl der verwendeten Zustände $d_{S_{tot},k}$. Für die inverse Liste gilt dies jedoch nicht, da sie die Nummern der Zustände als p -adische Zahl interpretiert enthält. Das bedeutet, daß die inverse Liste Einträge vom kleinsten Zustand bis zum größten Zustand beinhalten muß. Z. B. $S_{tot}^z = 0$ Sektor:

$$|0000\dots 01\dots 11\rangle \longrightarrow 0|0101\dots 01\dots 10\rangle \approx \left(\frac{2^N - 1}{3} - 2^{N/2} + 1 \right) \quad (1.88)$$

Die inverse Liste besitzt damit weiterhin fast die Dimension der ursprünglichen Basis und außerdem sehr viele Nummern zu Zuständen, die nicht mehr in der Unterraumbasis vorkommen.

Die Verringerung der Dimension der inversen Liste auf eine der Unterraumbasis entsprechende ist einer der wesentlichen Punkte bei der numerischen Diagonalisierung, ohne die eine effektive Untersuchung nicht möglich wäre.

Eine Lösung des Problems bietet die sogenannte Lin-Kodierung. Dabei zerlegt man jeden Basiszustand in zwei Teilzustände von $0 - (N/2 - 1)$ und $N/2 - (N - 1)$. N sei doppelt gerade.

Die inversen Listen zu diesen haben jeweils die Dimension $2^{N/2}$ und sind damit deutlich kleiner als die ursprüngliche inverse Liste oder auch nur als die Liste der Unterraumbasis. Die Nummer eines Zustandes ergibt sich als Summe aus den Nummern der Halbzustände. In dem hier vorliegenden Fall bedeutet das:

- Erzeugung der halben Basis geordnet nach Werten von $S_{z,l/r}^{tot}$:

$$\begin{aligned}
 \text{Array : } & (00\dots00, \\
 & 0..01, \dots, 100\dots0, \\
 & 00\dots011, 00\dots0110, \dots, 110\dots00, \\
 & \dots, \\
 & 0111\dots111, 101\dots111, 111\dots1110, \\
 & 11\dots11) \tag{1.89}
 \end{aligned}$$

Daraus werden die beiden Halbbasen hergestellt, indem man für die linke alle Zustände entfernt, die das $(N/2 - 1)$ Bit gesetzt haben, außer demjenigen, bei dem alle Bits gesetzt sind, und für die rechte alle Zustände, bei denen das 0 Bit nicht gesetzt ist, außer dem Zustand, bei dem überhaupt kein Bit gesetzt ist. Alle diese so entfernten Zustände führen nie auf einen Zustand, der, als Zahl interpretiert, minimal ist.

- Die Lin-Kodierung beschreibt das Vorgehen bei der Verteilung der Nummern auf die Zustände.

Auf der linken Seite werden nacheinander alle Zustände abgearbeitet. Jeder linke Zustand mit $S_{z,l}^{tot}$ wird mit allen rechten Zuständen mit $S_{z,r}^{tot} = S_z^{tot} - S_{z,l}^{tot}$ verknüpft. Jeder so zusammengesetzte Zustand wird daraufhin getestet, ob er ein Repräsentant ist, d.h. der minimale Zustand eines Orbits. Ein Orbit eines Zustandes besteht aus allen Zuständen, die aus diesem durch Anwendung der Symmetrieoperationen hervorgehen. Dann bekommt jeder linke und jeder rechte Zustand eine Zahl zugeteilt, deren Summe eine eindeutige Nummer des Gesamtzustandes ergibt. Die Numerierung ist i.allg. nicht durchlaufend, d.h., es entstehen Lücken in der Basis, die dadurch vergrößert wird. Die Anzahl der Lücken kann durch die Reihenfolge der Elemente der Halbbasen minimiert werden. Diese Vergrößerung der Basisdimension ist einer der Nachteile der Lin-Kodierung. Als Beispiel wird das Vorgehen anhand von $N = 8$ und $S_z^{tot} = 1$ in Tabelle 1.1 skizziert:

Links	(r) Nr.	Rechts	(l) Nr.	Gesamt	(r+l) Nr.
0001	0	1111	0	0001 1111	0
0011	1	0111	0	0011 0111	1
0011	1	1011	1	0011 1011	2
0011	1	1101	2	0011 1101	3
0101	4	0111	0	0101 0111	4
0101	4	1011	1	0101 1011	5
0101	4	1101	2	0101 1101	6
0110	7	0111	0	0110 0111	kein Repräsentant
0110	7	1011	1	0110 1011	kein Repräsentant
0110	7	1101	2	0110 1101	kein Repräsentant
0111	7	0011	2	0111 0011	kein Repräsentant
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Tabelle 1.1

- Die Wirkung des Hamiltonians auf einen Basiszustand $|\psi\rangle$ mit einer definierten Magnetisierung:

$$\psi = \frac{1}{\mathcal{N}_\psi} \sum_{l=0}^{N-1} e^{ikl} T^l R_\psi \quad (1.90)$$

$$\mathcal{N}_\psi^2 = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{l'=0}^{N-1} \langle R_\psi | T^{l'} T^l | R_\psi \rangle \quad (1.91)$$

$$\langle \xi | H | \psi \rangle = \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{ik(l-l')} \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \langle R_\xi | T^{l'} H T^l | R_\psi \rangle$$

$$[H, T] = 0$$

$$= \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{ik(l-l')} \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \langle R_\xi | T^{l'} T^l H | R_\psi \rangle$$

$$= \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{ik(l-l')} \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \langle R_\xi | T^{l'} T^l \alpha | \tilde{R}_\xi \rangle$$

$$\alpha \in \mathbb{C} \quad p \in \mathbb{N} \quad \text{und} \quad \tilde{R}_\xi \in \text{Orbit}(R_\xi) \rightarrow \tilde{R}_\xi = e^{ikp} T^p R_\xi$$

$$= \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{ik(l-l')} \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \langle R_\xi | T^{l'} T^l \alpha e^{ikp} | R_\xi \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \alpha e^{ikp} \sum_{l,l'=0}^{N-1} e^{ik(l-l')} \langle R_\xi | T^{l'} T^l | R_\xi \rangle \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}_\psi \mathcal{N}_\xi} \alpha e^{ikp} \mathcal{N}_\xi^2 \\
&= \frac{\mathcal{N}_\xi}{\mathcal{N}_\psi} \alpha e^{ikp} \tag{1.92} \\
\implies \langle \psi | H | \xi \rangle &= \frac{\mathcal{N}_\xi}{\mathcal{N}_\psi} \alpha^* e^{-ikp}
\end{aligned}$$

Aus technischen Gründen wird im eigentlichen Programm das Matrixelement $\langle i | H | j \rangle$ berechnet und als das Matrixelement $\langle j | H | i \rangle^*$ interpretiert.

Parallelisierung des Algorithmus

Die Bearbeitung großer Kettenlängen und somit hoher Basisdimensionen benötigt lange Laufzeiten und große Mengen an Arbeitsspeicher.

Die neuen Parallelrechner bieten sich in dieser Hinsicht an. Sie stellen einen Verbund von einzelnen Prozessoren dar, die jeder für sich mit Arbeitsspeicher ausgestattet und vollkommen autark sind. Weiterhin sind diese Prozessoren noch durch ein aufwendiges und schnelles Netzwerk verbunden, so daß Kommunikation zwischen verschiedenen Prozessoren in akzeptabler Zeit möglich ist.

Mit der MPP CRAY-T3D 256 SC stand eine derartige Maschine zur Verfügung. Sie besteht aus 256 DEC Alpha-Prozessoren mit jeweils 64MB Arbeitsspeicher und einer Peakrate von 150MFlops. Dadurch war es möglich, Matrizen mit Basisdimensionen bis zu 160 Millionen zu diagonalisieren. Weiterhin stand ein Programmierwerkzeug zur Verfügung, das die parallele Programmierung gegenüber den gebräuchlichen message-passing Routinen äußerst erleichterte.

Bei der Programmierung muß man darauf achten, daß der Programmcode, abhängig vom Prozessor, bestimmte Handlungsweisen verlangt. Weiterhin müssen die großen Basisvektoren und Lanczos-Vektoren auf die verwendeten Prozessoren aufgeteilt werden, so daß jeder einzelne Prozessor "seinen" Teil dieser Arrays besitzt.

CRAFT ermöglicht es nun, diesen lokalen Daten globale Adressen zuzuordnen und wie gewohnt anzusprechen. Probleme können entstehen, wenn auf ein nicht lokales Arrayelement geschrieben wird. Wenn zwei solche Aktionen fast gleichzeitig erfolgen, kann es passieren, daß die zweite Aktion beginnt, bevor die erste beendet ist und somit die Daten der zweiten die der ersten überschreiben.

Um diese Probleme zu vermeiden, ist es erforderlich, nur lokale Schreibbefehle zuzulassen. (Daher berechnet man $\langle i|H|j\rangle^*$ und schreibt auf $|j\rangle$.) Wenn man diese Probleme nicht vollständig umgehen kann, ist es möglich, den Informationsfluß nach einer Abfrage so lange zu stoppen, bis die Aktion beendet wurde. Dies verringert jedoch erheblich die Geschwindigkeit des Programms.

1.4.2 Auswertung der Daten, Extrapolation

Es sind die Grundzustandsenergien und die niedrigen Anregungen für verschiedene Werte der Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn (α) und der alternierenden Kopplung (γ) bestimmt worden. Weiterhin sind die Grundzustandserwartungswerte der Korrelationslänge und der Stringkorrelationsfunktion bei endlichen Systemen berechnet und in verschiedenen Bereichen des Phasendiagramms mit MP-Ergebnissen verglichen worden. Die numerisch untersuchten Regionen sind im Phasendiagramm durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

Die Extrapolation der Resultate für Leiterlängen von $L = 8, 10, 12, 14$ Sprossen zum thermodynamischen Limes sind mittels

$$f(L) = f_\infty + \alpha \frac{e^{-L/\xi}}{L^p} \quad (1.93)$$

nach Barnes et al. [62] erfolgt. Dabei ist $p = 1$ zur Extrapolation der Grundzustandsenergie und $p = 2$ zu der der Anregungslücke benutzt worden. Die typischen quadratischen Fehler sind für die Grundzustandsenergie 10^{-10} und für die Anregungslücke 10^{-7} . Der Fitparameter ξ spiegelt die Längenskala des Systems wieder und entspricht qualitativ der Korrelationslänge. Zur Überprüfung der Genauigkeit der numerischen Berechnungen sind die Daten der regulären Spinleiter berechnet worden und zeigen völlige Übereinstimmung mit den Resultaten von Barnes et al. .

1.5 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die aus dem Variationsverfahren gewonnenen Ergebnisse für die Grundzustandsenergie und die Korrelationen sowie die Resultate der im MP-Formalismus konstruierten solitonischen Anregungen mit den Daten der exakten Diagonalisierung verglichen. Im Bereich der kritischen Linie konzentrieren sich die Untersuchungen auf das Verhalten der Anregungslücke bei Annäherung an die masselose Phase. Die niedrig liegenden Anregungen werden ebenfalls in der Umgebung der Shastry-Sutherland Linie untersucht, um das mögliche Vorhandensein einer spiralen Phase zu eruieren. Schließlich werden, um Aussagen über Phasengrenzen zu gewinnen, auf Pfaden zwischen der regulären Spinleiter und dem Dimermodell sowie dem Majumdar-Ghosh-Modell die Veränderungen der Energie, der Korrelationen und der Anregungslücke analysiert.

Auf der Linie vom ($S=1/2$) HAFM zu MG-Punkt ($\gamma = 0$) öffnet sich bei einem kritischen Wert der Kopplung übernächster Nachbarn ($\alpha = \alpha_c = 2 \times 0.241156$) eine Anregungslücke. An diesem Punkt ist die Feldtheorie des Modells konform invariant, und die logarithmischen Korrekturen bei der Skalierung der Energielücke verschwinden. Die numerische Extrapolation der Werte der Anregungslücke in der Nähe des konformen Punktes ist schwierig, da das niedrig liegende angeregte Singlett mit dem Grundzustandssinglett auf der MG-Seite im thermodynamischen Limes entartet ist. In Abbildung 1.3 ist die Energielücke zwischen dem angeregten Singlett und dem ersten angeregten Triplett zur Extrapolation verwendet worden, um vernünftige Ergebnisse zu erhalten. Die besten Ergebnisse zur Ermittlung des kritischen Wertes der Kopplung α sind mit DMRG-Methoden ($\alpha_c = 0.2412$ [44]) und finite-size Extrapolationen der Ergebnisse für die Spin-Spin-Korrelationslänge aus ED ($\alpha_c = 0.241156$) [19] ermittelt worden.

Die Resultate der Variationsrechnung auf der kritischen Linie vom $S = 1/2$ HAFM zum MG-Modell erweisen sich nur für $\alpha > \alpha_c$ als sinnvoll, da der MP-Ansatz nicht in der Lage ist, die algebraischen Korrelationen der masselosen Spektren zu beschreiben (Abb. 1.5). Nichtsdestoweniger haben dort die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie nur 1% bis 5% Abweichung von den exakten Resultaten (Abb. 1.4).

Die Ergebnisse für den String-Ordnungsparameter sind durch das Singlettgewicht B^2 gegeben, das in Abbildung 1.6 gezeigt ist, $B^2 \geq \frac{1}{4}$ links der Shastry-Sutherland-Linie und $B^2 \leq \frac{1}{4}$ rechts davon.

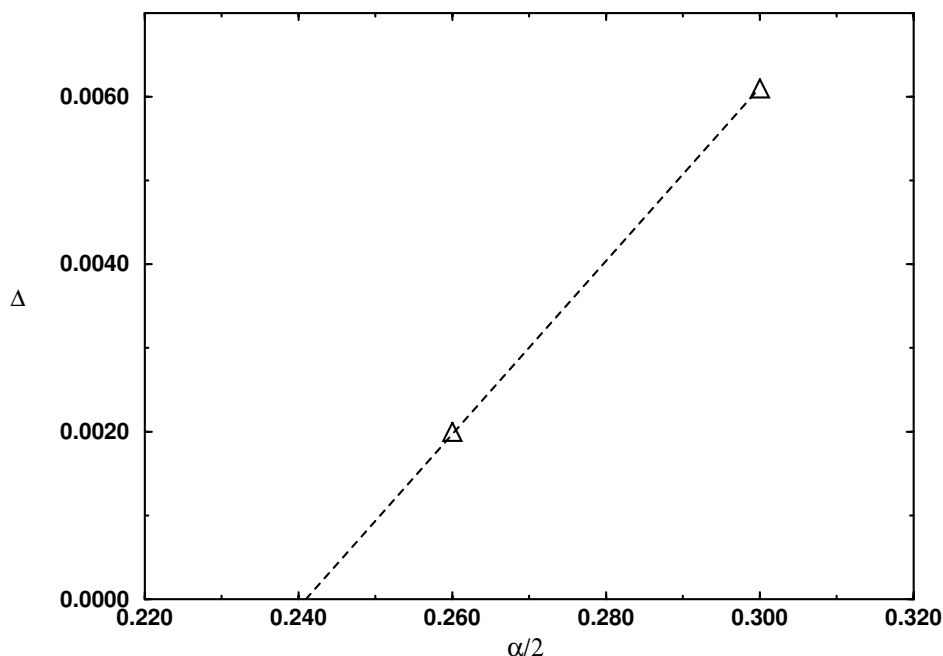


Abb. 1.3 Extrapolation der Energielücke (Δ) zwischen angeregtem Singlett und Triplet.

Die Werte für die beiden Grundzustände des MG-Modells unterscheiden sich ($B_{|0_r\rangle}^2 = 0, B_{|0_d\rangle}^2 = \frac{1}{4}$) aufgrund der bezüglich der Symmetrietransformation asymmetrischen Definition des String-Ordnungsparameters. Die Resultate für die Grundzustandsenergie sind auf der Symmetrielinie verglichen mit denen des RVB-Ansatzes von Zeng und Parkinson [57] für $\alpha \geq 1$ schlechter und für $\alpha < 1$ besser. Beide Ansätze führen für $\alpha \geq 1$ auf dieselbe Korrelationslänge. Für $\alpha < 1$ wächst die Korrelationslänge im MP-Formalismus schneller. Das Verhalten der Korrelationslänge kann in der Nähe von $\alpha = 1$ durch das mögliche Vorhandensein einer spiralen Phase, d.h. eines räumlich modulierten Grundzustandes, beeinflusst worden sein. Der MP-Zustand kann einem solchen Verhalten nicht Rechnung tragen, und der alternierende Ansatz aus 1.38 hat eine höhere Variationenergie.

Auf Pfaden senkrecht zu der Symmetrielinie in der Umgebung des konformen Modells sind die Grundzustandsenergie und die niedrigen Anregungen bestimmt worden. Diese Resultate sollten zum Verständnis des Phasenübergangs von der masselosen Phase in der Nähe des $S = 1/2$ HAFM zur Phase mit einer endlichen Anregungslücke im Spektrum in der Nähe des MG-Punktes beitragen. In

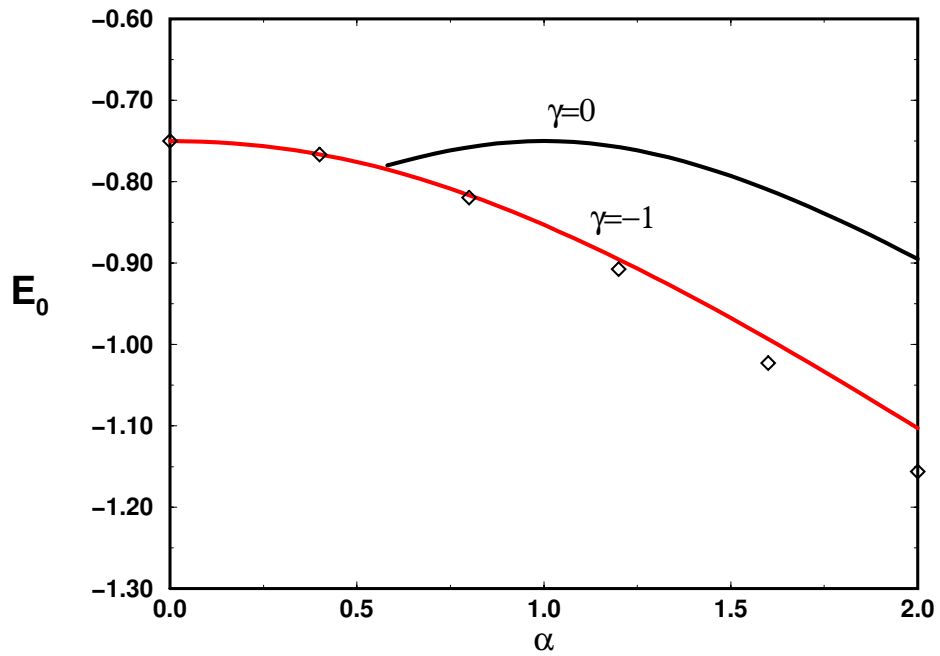
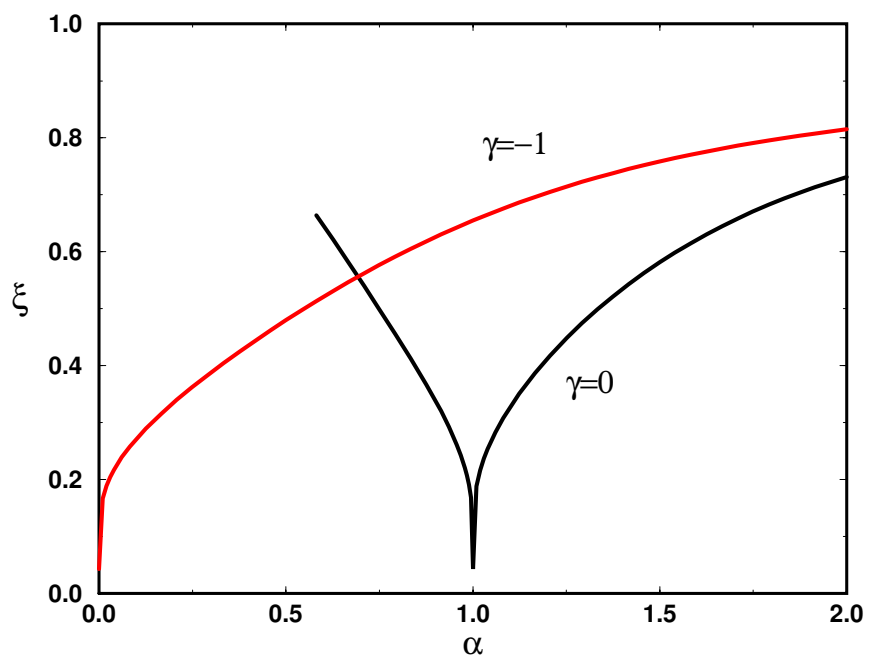
Abbildung 1.4: Grundzustandsenergie mittels MP-Rechnungen (\diamond : ED)

Abbildung 1.5: Korrelationslänge mittels MP-Rechnungen

Abbildung 1.7 und Tabelle 1.2 ist das Verhalten der Anregungslücke bei Annäherung an die Symmetrielinie, d.h. das Verschwinden der Lücke für $\alpha \leq \alpha_c$ und das Schrumpfen auf einen kleinen aber endlichen Wert für $\alpha > \alpha_c$ gezeigt.

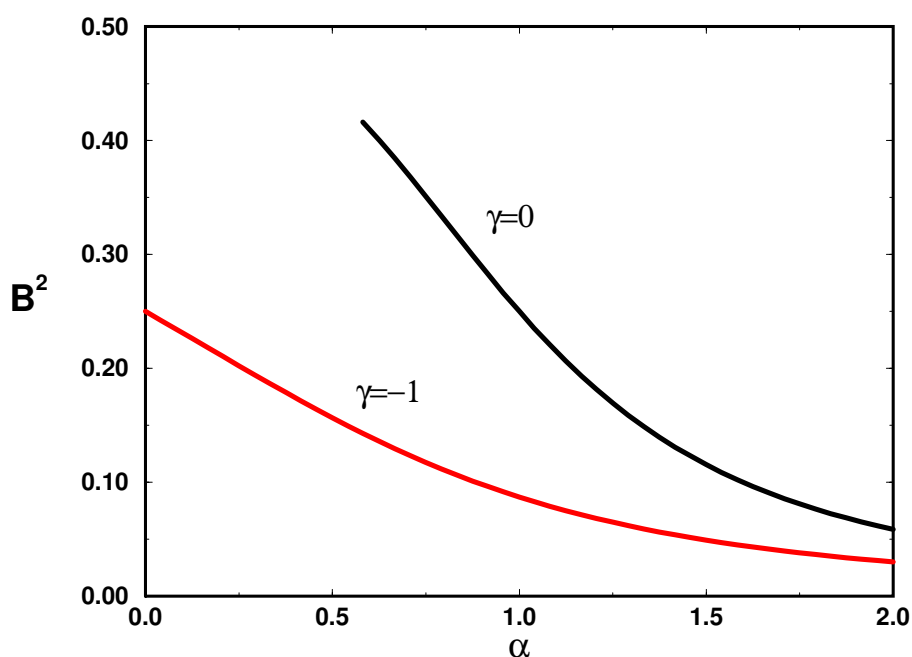
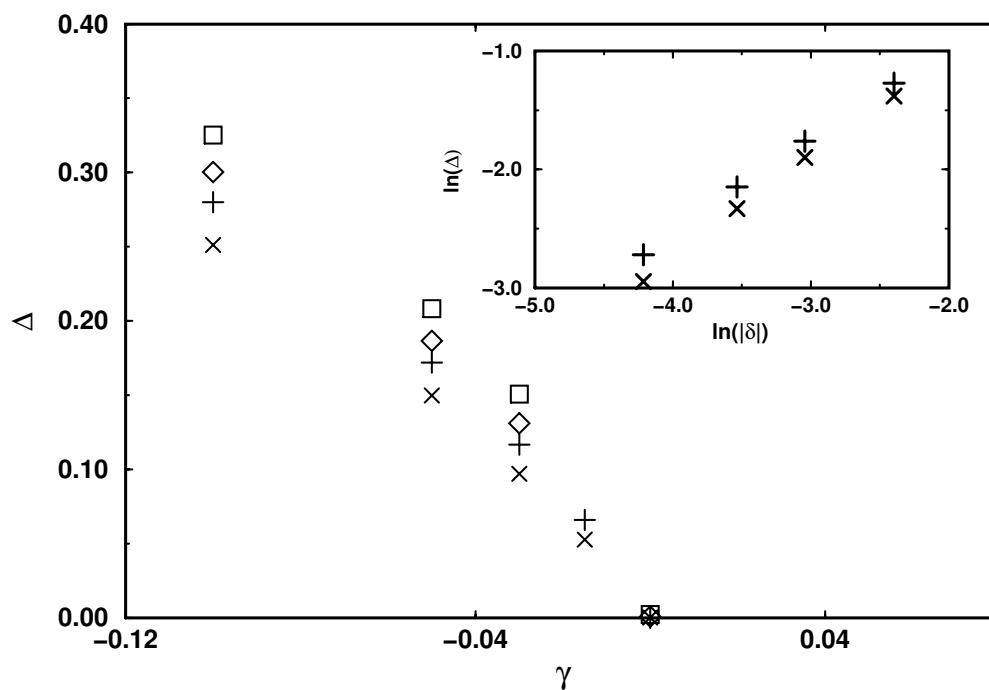


Abbildung 1.6: Singlettgewicht mittels MP-Rechnungen

Für $\gamma \ll 1$ und $\alpha = 0.3$ (0.44) ist das Verhalten der Energielücke unter der Annahme eines Potenzgesetzes $\Delta = |\delta|^y$ mit dem Dimerisierungsparameter $\delta = P\gamma/(\gamma + 2)$ analysiert worden, um es mit der Voraussage von Cross und Fischer [63] $y = 2/3$ zu vergleichen.

Eine doppelt logarithmische Darstellung der Ergebnisse (kleines Bild in Abbildung 1.7) lieferte $y \approx 0.862$ bei $\alpha = 0.30$ und $y \approx 0.795$ bei $\alpha = 0.44$, also einen von α abhängenden Wert etwas größer als vorhergesagt. Die Diskrepanz beruht auf den logarithmischen Korrekturen, die nur am konformen Punkt selbst verschwinden.

Abbildung 1.7: Energielücke (Δ) in der Umgebung der kritischen Linie.

Anregungsenergie					
$\alpha =$	$\gamma = 0.10$	$\gamma = 0.05$	$\gamma = 0.03$	$\gamma = 0.015$	$\gamma = 0.00$
0.30	0.2511807	0.1497976	0.0971629	0.0526672	< 0.00003
0.44	0.2799086	0.1720255	0.1167782	0.0660249	< 0.00003
0.52	0.3002298	0.1864918	0.1310506		0.0009896
0.6	0.3251090	0.2082006	0.1507519		0.0023626

Tabelle 1.2 Verlauf der Anregungsenergien senkrecht zur kritischen Linie für verschiedene Werte von α .

Die Energielücke in der Nähe der kritischen Linie ist bei dem Wellenvektor $k = 0$ gefunden worden. Im Fall der regulären Spinleiter liegt die Energielücke bei $k = \pi$. Um die Verdopplung der magnetischen Einheitszelle, die sich in der Veränderung des Wellenvektors widerspiegelt, zu analysieren, ist die Anregungslücke auf einer Geraden vom $S = 1/2$ HAFM zum Punkt $\gamma = -1, \alpha = 1$

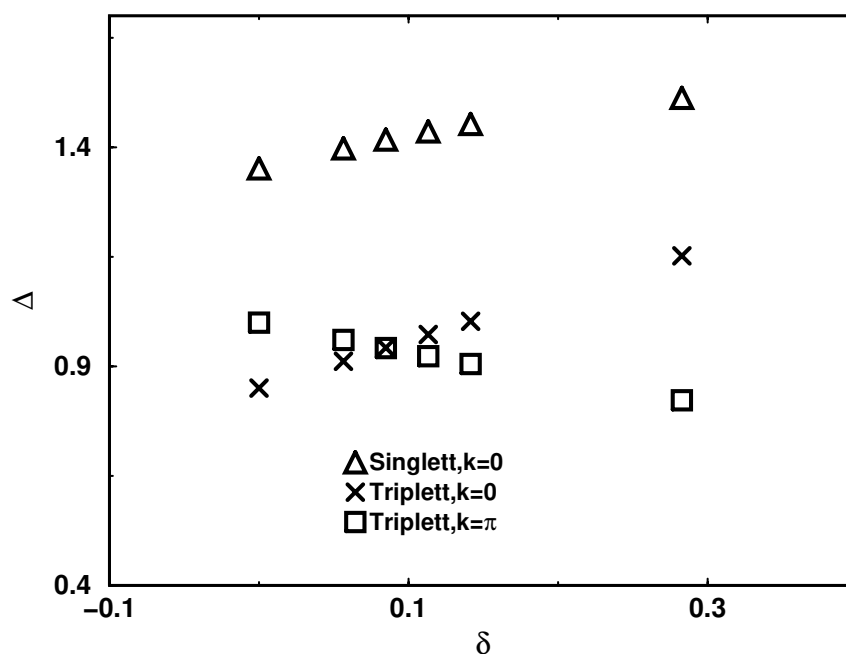


Abbildung 1.8: Verhalten der Anregungslücke (Δ) beim Passieren der Shastry—Sutherland—Linie ($\alpha = -\gamma$, $\delta = (\alpha^2 + \gamma^2)^{1/2}$).

für $k = \pi$ und $k = 0$ berechnet worden. Die extrapolierten Resultate sind in Abbildung 1.8 zu sehen.

Es zeigt sich, daß die Anregungen in den Nähe der Shastry—Sutherland—Linie bei $\alpha \approx 0.55$ entarten. Die Resultate für die Anregungslücke und die Grundzustandenergie erreichen in völlig monotoner Weise die Leiterresultate. Die numerischen Daten bestätigen allgemein die Ergebnisse der MP—Rechnungen. Die Variation der betrachteten Größen ist über weite Teile des Phasendiagramms glatt und stetig. Es zeigen sich keine Hinweise auf das Vorhandensein einer Phasengrenze. Eine qualitative Veränderung des Spektrums auf einem Weg durch die Shastry—Sutherland—Linie ist indes schon zu beobachten und könnte ein Hinweis auf das Vorhandensein einer spiralen Phase sein. Zur Klärung dieses Punktes ist die Dispersionsrelation für $N = 24$ in diesem schmalen Übergangsbereich berechnet worden (Abbildung 1.8 und 1.9). Dabei zeigte sich in dem an die Shastry—Sutherland—Linie angrenzenden Gebiet eine Region, in der das Minimum bei einem endlichen Wert des Wellenvektors liegt.

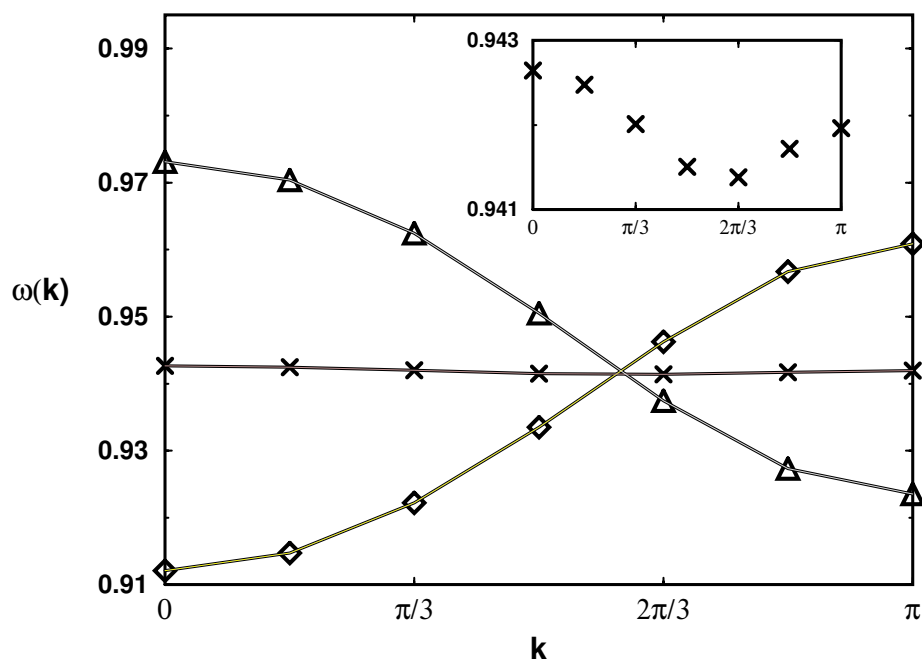


Abbildung 1.9: Dispersionsrelationen in unmittelbarer Nähe der Shastry–Sutherland Linie ($\alpha = -\gamma$), (\diamond) $\alpha = 0.54$, (\triangle) $\alpha = 0.58$, (\times) $\alpha = 0.56$.

Die Dispersion ist jedoch sehr schmal, und da die Resultate für Systemgrößen von $N = 24$ erhalten worden sind und die Extrapolation schwierig ist, bleibt es fraglich, ob es sich um einen finite-size Effekt handelt. Andererseits ist die Korrelationslänge in der Nähe der Shastry–Sutherland-Linie sehr klein ($\xi_{\alpha=1+\gamma} = 0$), so daß die Werte für $N = 24$ das thermodynamische Verhalten bereits gut beschreiben.

Im allgemeinen festigen und bestätigen die numerischen Resultate die Aussagen der MP-Rechnungen. Die Änderungen der betrachteten Größen im Phasendiagramm sind stetig und glatt. Bei den Anregungen sieht man jedoch ein Crossover der niedrigen Anregungen in der Nähe der Shastry–Sutherland-Linie. Dies kann, ebenso wie die Tatsache, daß das Maximum des Strukturformfaktors $S(k)$ bei endlichen k -Werten zu finden ist, ein weiteres Indiz für eine spirale Phase sein [44, 57]. Eine genauere Untersuchung ist somit im Bereich des Crossovers erforderlich.

Grundzustandsenergie						
$\alpha =$	$N = 12$	$N = 16$	$N = 20$	$N = 24$	$N = 28$	$N \rightarrow \infty$
0.0						0.75
0.4	0.766403	0.766398	0.766398	0.7663978	0.7663978	0.7663978
0.8	0.819531	0.819281	0.819256	0.819254	0.819253	0.819253
1.2	0.909511	0.907827	0.907510	0.907443	0.907428	0.907424
1.6	1.029126	1.024466	1.023234	1.022867	1.022749	1.022687
Anregungsenergie						
0.0						1.0
0.4	0.821753	0.821709	0.821707	0.821707	0.821707	0.821707
0.8	0.692602	0.690373	0.690074	0.690032	0.690026	0.690025
1.2	0.619862	0.605463	0.601817	0.600848	0.600582	0.600482
1.6	0.602390	0.563670	0.549962	0.544825	0.542838	0.541330

Tabelle 1.3 Grundzustands- und Anregungsenergien parallel zur kritischen Linie ($\gamma = -1$) für verschiedene Werte von α .

In den Abbildungen 1.4 - 1.6 sind die Ergebnisse für die Energie, die Korrelationslänge und das Singlettgewicht aus den MP-Rechnungen auf einem Pfad mit $\gamma = -1$ parallel zur kritischen Linie gezeigt und mit den numerischen Resultaten (Tabelle 1.3) verglichen worden.

Die Untersuchung entlang der Linie $\gamma = -1$ vom Dimerpunkt zur regulären Spinleiter soll Hinweise auf Phasengrenzen zwischen diesen beiden Modellen liefern. Mit den in Abschnitt 1.3.4 gewonnen Resultaten für die Anregungen im MP-Formalismus sind zusätzlich noch die Dispersionsrelationen für einige Punkte ($\alpha = 2.0, 1.5, 1.0, 0.5$) auf diesem Weg bestimmt und mit numerischen Ergebnissen für $N = 24$ Spins verglichen worden (Abbildung 1.11.a-d). Die Korrekturen zur Dispersionsrelation aufgrund der endlichen Systemgröße sind wegen der geringen Korrelationslängen auf diesem Pfad vernachlässigbar. Da die Korrelationslänge mit wachsendem α ansteigt, weist die Dispersionsrelation am Leiterpunkt die stärksten Korrekturen auf. Die prozentuale Abweichung der Anregungslücke bei $k = \pi$ zwischen $N = 24$ und $N \rightarrow \infty$ beträgt bei der regulären Spinleiter weniger als 3% (Abbildung 1.10)

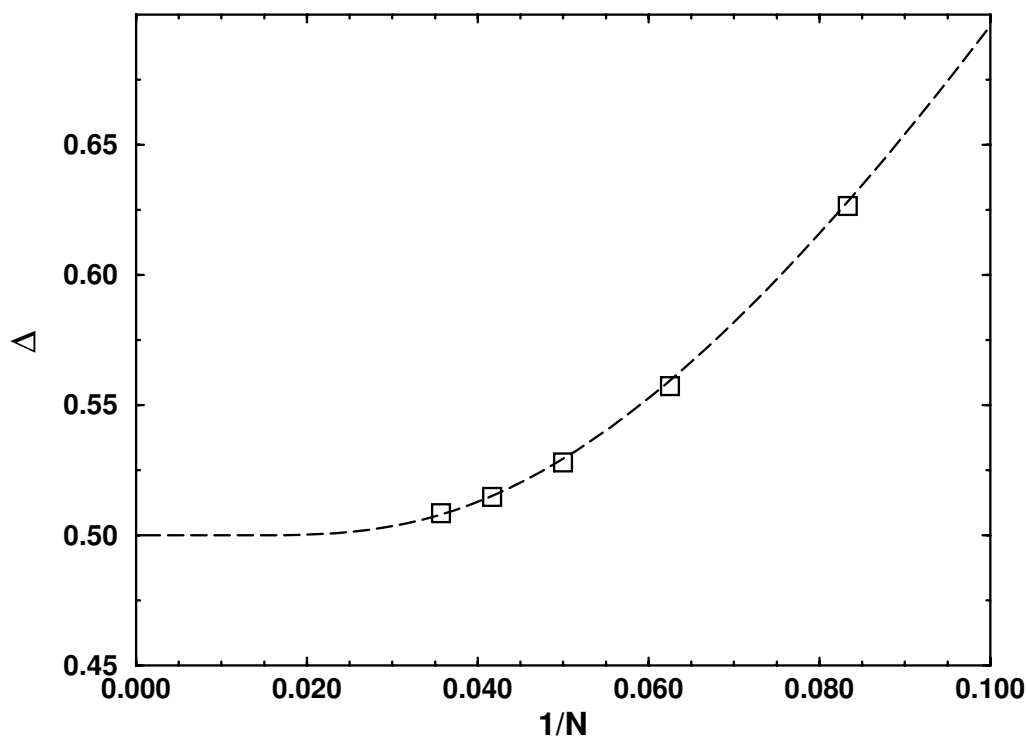
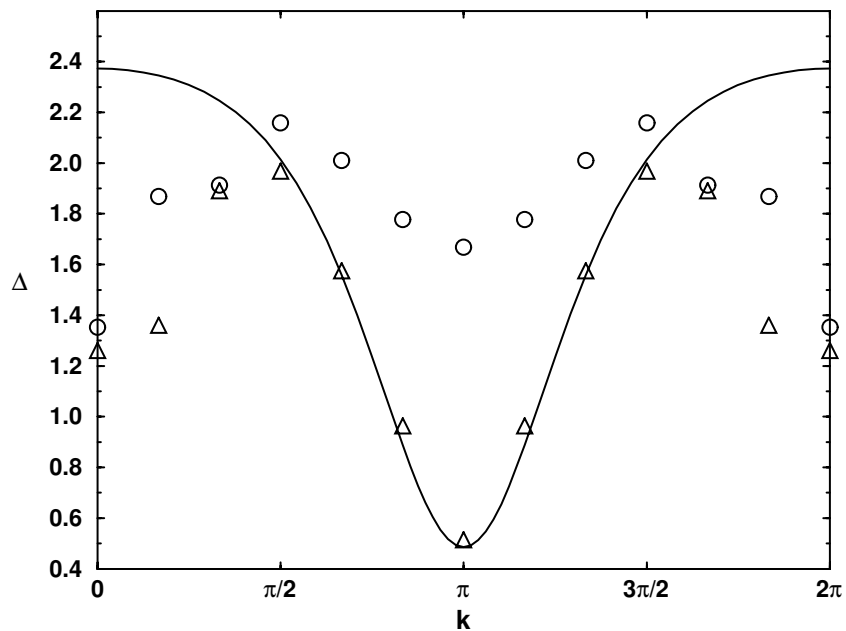
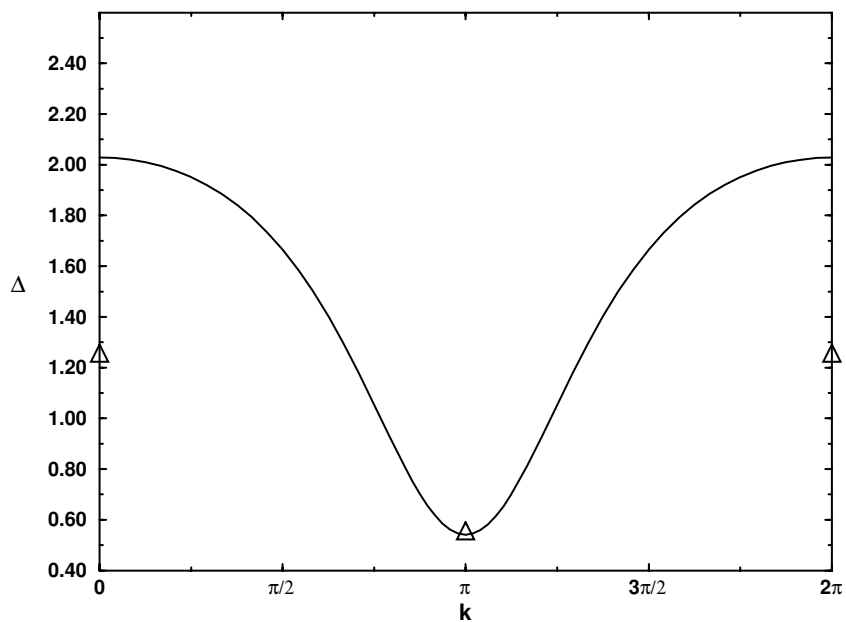


Abbildung 1.10 Finite-size Extrapolation der Anregungslücke (Δ) der regulären Spinleiter.

Es zeigt sich, daß die Crackion-Näherung auf diesem Weg eine gute Beschreibung der tatsächlichen physikalischen Anregungen liefert. Die niedrigsten Anregungen bei $k \leq \pi/2$ und $k \geq 3\pi/2$ sind Zweiteilchenanregungen und können aus den vorgestellten Ergebnissen bei $\pi/2 \leq k \leq 3\pi/2$ konstruiert werden. Weder bei der Betrachtung der Anregungen noch bei der Energie und der Korrelationsfunktion zeigen sich Hinweise auf Phasengrenzen auf dem Weg vom Dimer-Punkt zur regulären Spinleiter. Bei der Suche nach Phasengrenzen auf einem Pfad, kommend vom MG-Punkt hin zur Spinleiter ($\alpha = 1, \gamma = -1.0, -0.35, -0.25, -0.06$), deutet sich die Existenz einer spiralen Phase an (Abbildung 1.12.a - d).

Abbildung 1.11.a $\alpha = 2.0, \gamma = -1.0$ Abbildung 1.11.b $\alpha = 1.5, \gamma = -1.0$

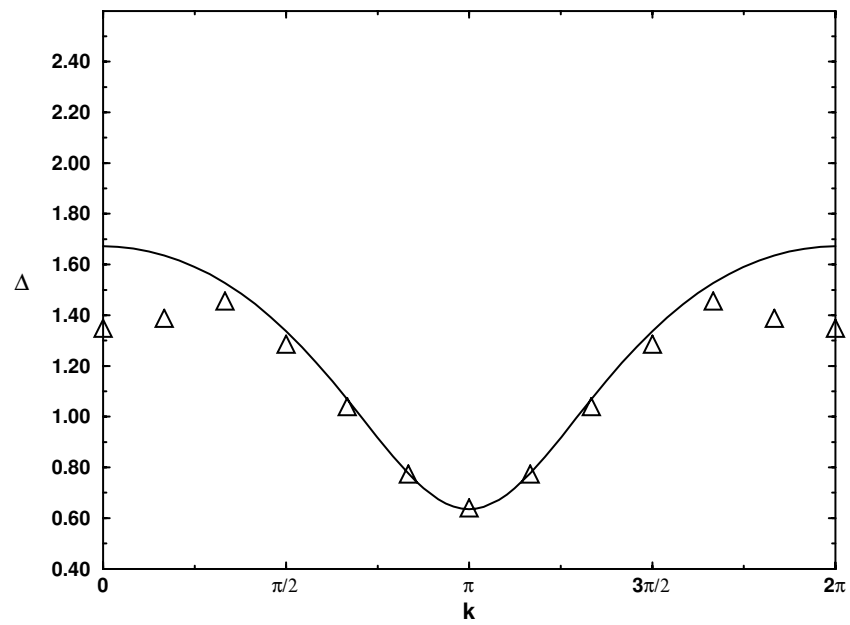
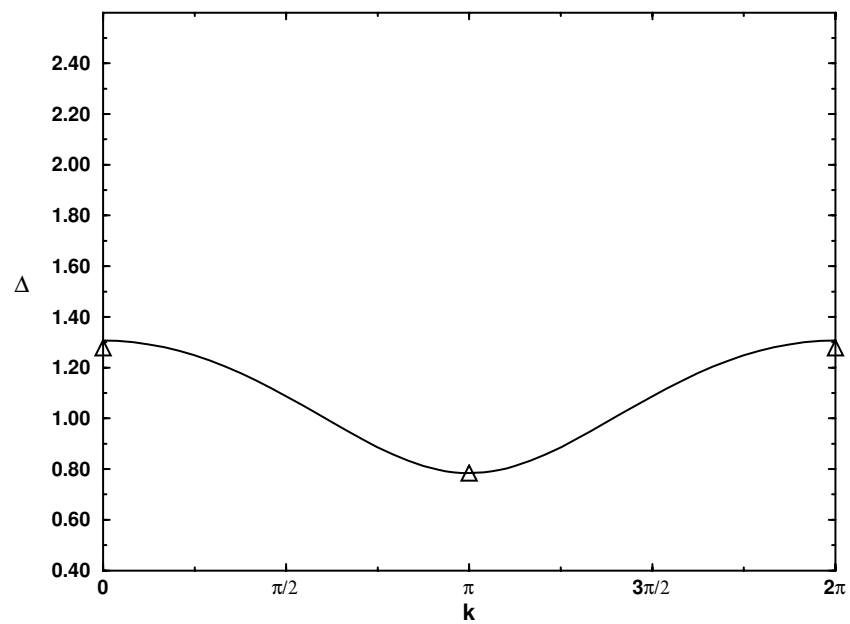
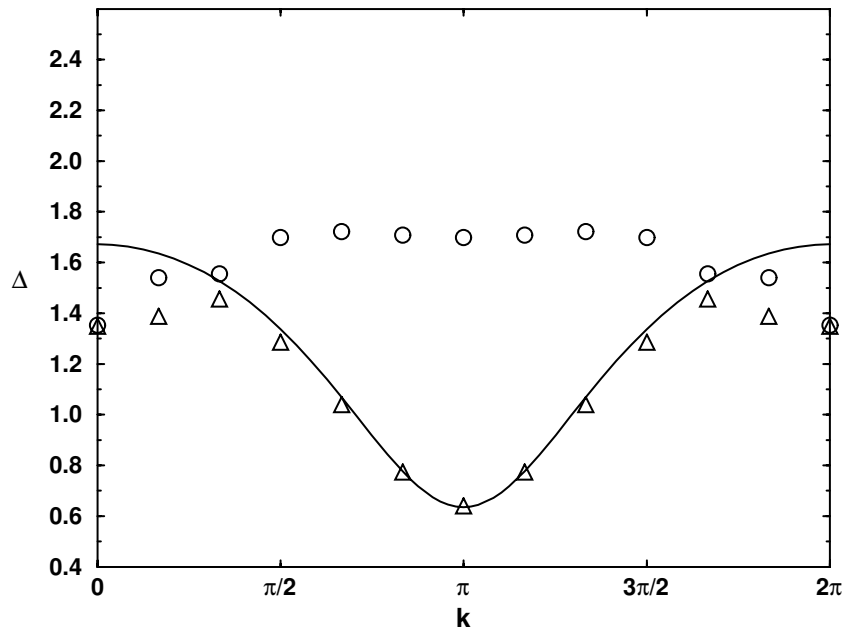
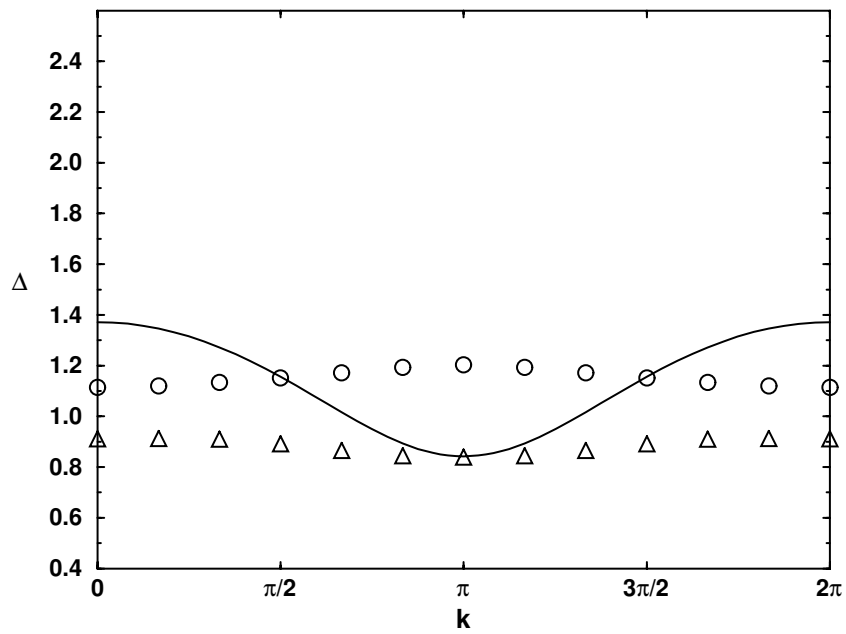
Abbildung 1.11.c $\alpha = 1.0, \gamma = -1.0$ Abbildung 1.11.d $\alpha = 0.5, \gamma = -1.0$

Abbildung 1.9 Dispersionsrelationen für verschiedene Punkte auf dem Weg vom Dimer-Punkt zur regulären Leiter (\circ : Singlett, Δ : Triplett).

Abbildung 1.12.a $\alpha = 1, \gamma = -1.0$ Abbildung 1.12.b $\alpha = 1, \gamma = -0.35$

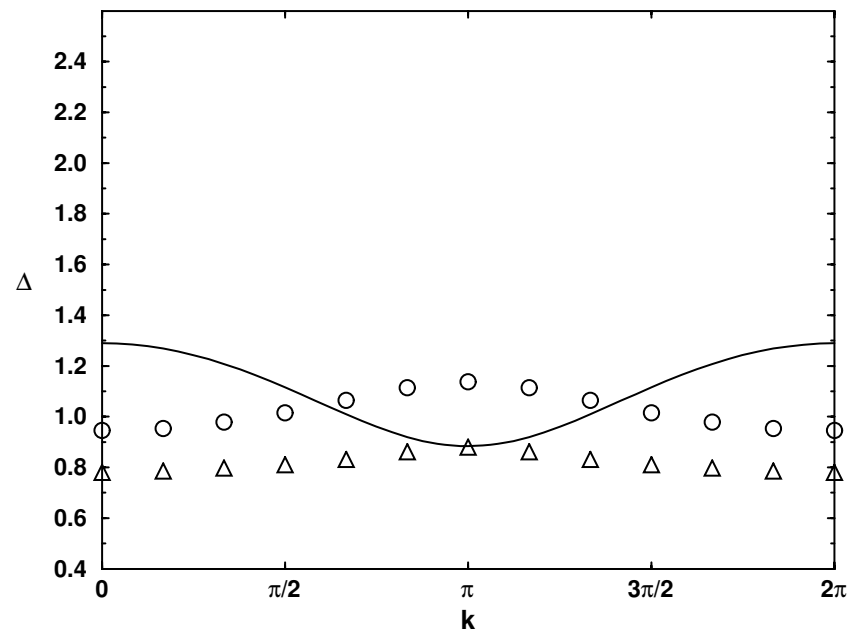
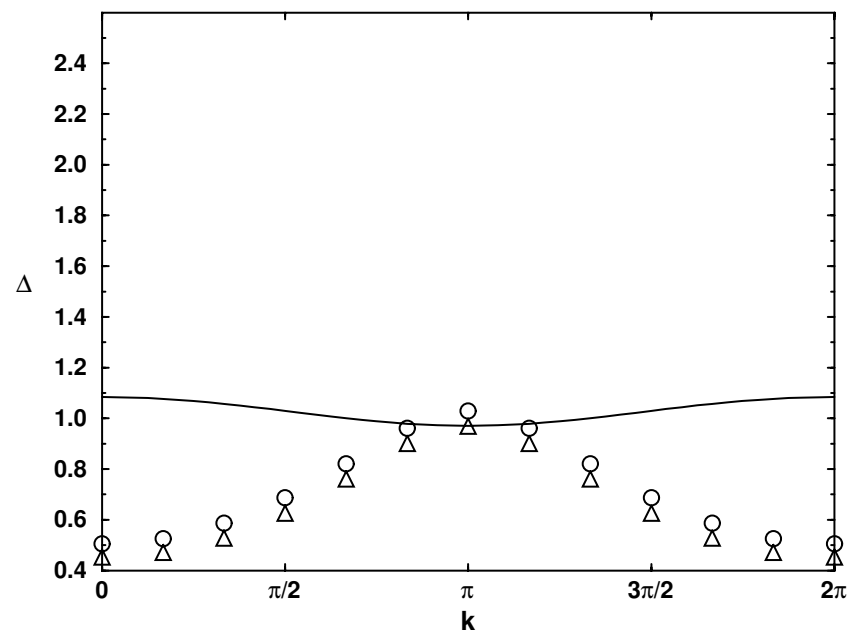
Abbildung 1.12.c $\alpha = 1, \gamma = -0.25$ Abbildung 1.12.d $\alpha = 1, \gamma = -0.06$

Abbildung 1.12 Dispersionrelationen für verschiedene Punkte auf dem Weg vom MG-Punkt zur Spinleiter (\circ : Singlett, \triangle : Triplett).

Ebenso wie auf dem vorherigen Pfad zeigt sich auch hier kein Hinweis auf eine Phasengrenze, da die Energielücke endlich bleibt und kein Crossover in der Grundzustandsenergie stattfindet. Andererseits gibt es doch qualitative Unterschiede, die das Versagen der Crackionbeschreibung in der Nähe des MG-Punktes zur Folge haben. Die Verschiebung des Minimums der Dispersionsrelation von $k = \pi$ zu $k = 0$ ist durch eine Beschreibung der Anregungen, wie sie hier vorgestellt wurde, nicht zu erreichen. So gut die Werte bei $k = \pi$ mit den numerischen Ergebnissen übereinstimmen, so schlecht sind sie für $k = 0$. Eine Konstruktion der Resultate bei $k = 0$ als Mehrteilchenanregungen ist hier nicht möglich.

Eine bessere, diesem Verhalten Rechnung tragende Beschreibung müßte das Delokalisieren des Crackions beinhalten. Ein solcher Ansatz ist erfolgreich von Brehmer et al. [64] benutzt worden und beschreibt die numerischen Daten hinreichend gut.

Die Ergebnisse des MP-Ansatzes zeigen für die Energie auf der Linie vom MG-Punkt zum Dimer-Punkt (Shastry-Sutherland-Linie) die exakte Grundzustandsenergie ($a = b = 1/2$, $E_{MG} = -3/4L$) und ein Verschwinden der Korrelationslänge. Die Formulierung einer Anregung in der MP-Beschreibung

$$\sum_{n=1}^L e^{ikn} |s\rangle_1 |s\rangle_2 \dots |t\rangle_n \dots |s\rangle_N \quad (1.94)$$

führt auf dieser Linie zu einem Eigenzustand und zu einer exakten Anregung bei $k = \pi$ [49], die jedoch nur am Dimerpunkt auch mit der niedrigst liegenden $k = 0$ Mode entartet ist. Diese Entartung erklärt somit auch, daß auf dem Weg vom Dimerpunkt zur regulären Spinleiter keine Änderung des Wellenvektors der niedrigsten Anregung auftritt, da am Dimerpunkt von der $k = \pi$ Mode ausgegangen wurde.

Im Bereich jenseits der Shastry–Sutherland–Linie, in der Umgebung der Spinleiter, treten derartige Effekte nicht mehr auf, und der MP–Ansatz liefert eine gute Beschreibung der Dynamik.

Die Resultate für die reguläre Spinleiter sind:

$$\begin{aligned}
 (\text{MP–Ansatz}): \quad & \frac{E_0}{L} = -1.102 & \xi &= 0.815 \\
 (\text{Fan + Ma [65]}): \quad & \frac{E_0^{F+M}}{L} = -1.112 & \xi^{F+M} &= 0.238 \\
 (\text{ED [56]}): \quad & \frac{E_0}{L} = 1.156 & \xi &= 3.19
 \end{aligned} \tag{1.95}$$

Die Abweichung der beiden Variationsansätze um ungefähr 1% scheint vernachlässigbar bei dem Vergleich mit den exakten Werten. Im Haldanefall betrug die Abweichung der Grundzustandsenergie in Kennedy–Tasaki Näherung von dem exakten Wert ebenfalls 5%. Beide Variationansverfahren führen erwartungsgemäß auf im Vergleich zu den Resultaten von White et al. [56] reduzierte Korrelationslängen, da die MP–Ansätze die Korrelationslängen gewöhnlich unterschätzen. Im Haldanefall führt die AKLT–Wellenfunktion auf $\xi = 0.9102$, während der exakte Wert bei $\xi = 6.2$ liegt.

In den Abbildungen 1.13 - 1.16 wird illustriert, wie sich der Limes großer negativer γ –Werte hin zum Haldanegrenzfall in das Bild der verallgemeinerten Spinleiter einfügt. In diesem Limes führt die Minimierung der Energie zum Verschwinden der Singletts auf den Diagonalen ($B \rightarrow 0$) (Abbildung 1.14). Diese Untersuchung soll zeigen, ob es Phasengrenzen auf dem Weg von der regulären Spinleiter zum Haldanelimes gibt. Es sind die Ergebnisse für die Grundzustandsenergie (Abbildung 1.13), die Anregungslücke (Abbildung 1.15) und die Korrelationslänge (Abbildung 1.16) auf diesem Weg dargestellt.

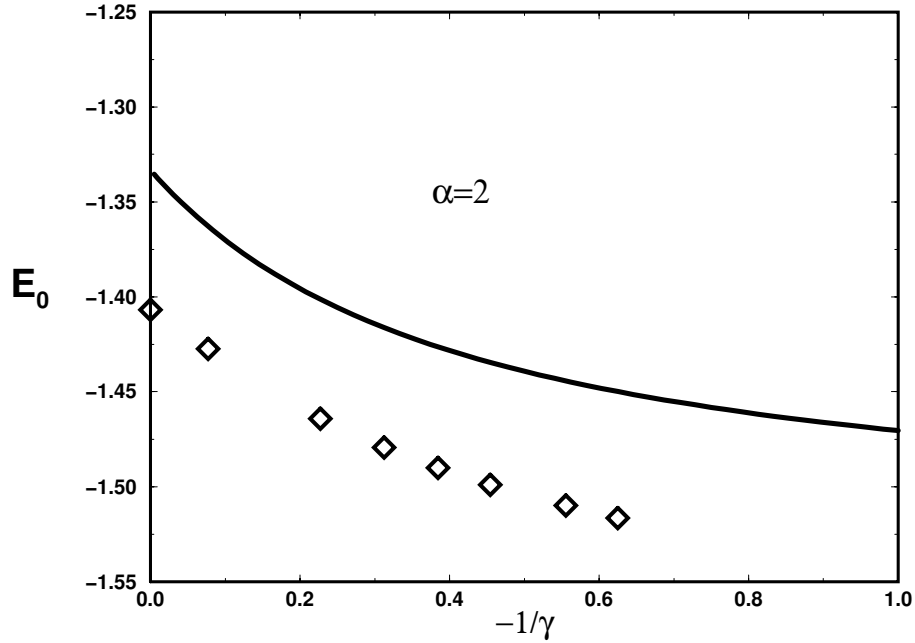
Die Minimierung des Erwartungswertes der Energie liefert im Haldanegrenzfall

$$E_0^{S=1} = \lim_{\gamma \rightarrow -\infty} E_0 \approx \left(\frac{1+\gamma}{4} - \frac{\alpha+1}{3} + \frac{1}{3(1+\gamma)} \right) L \tag{1.96}$$

und für das Singlettgewicht

$$B^2 \approx \frac{1}{3(1+\gamma)^2}. \tag{1.97}$$

Der erste Term in der Energie ist die interne Energie der Tripletts, die in diesem Grenzfall die $S = 1$ Plätze repräsentieren.

Abbildung 1.13: Grundzustandsenergie $\alpha = 2$

Es ergeben sich im Grenzfalle unendlich großer, negativer γ Werte die AKLT-Zustände als Grundzustände des MP-Ansatzes mit der zugehörigen Energie.

$$A^2 = \frac{1}{3} \quad E_0 = -\frac{4}{3}J_{eff} \quad J_{eff} = \frac{\alpha + 1}{4} \quad (1.98)$$

Für die Anregungsenergien ergeben sich im Haldanelimes ($B = 0$)

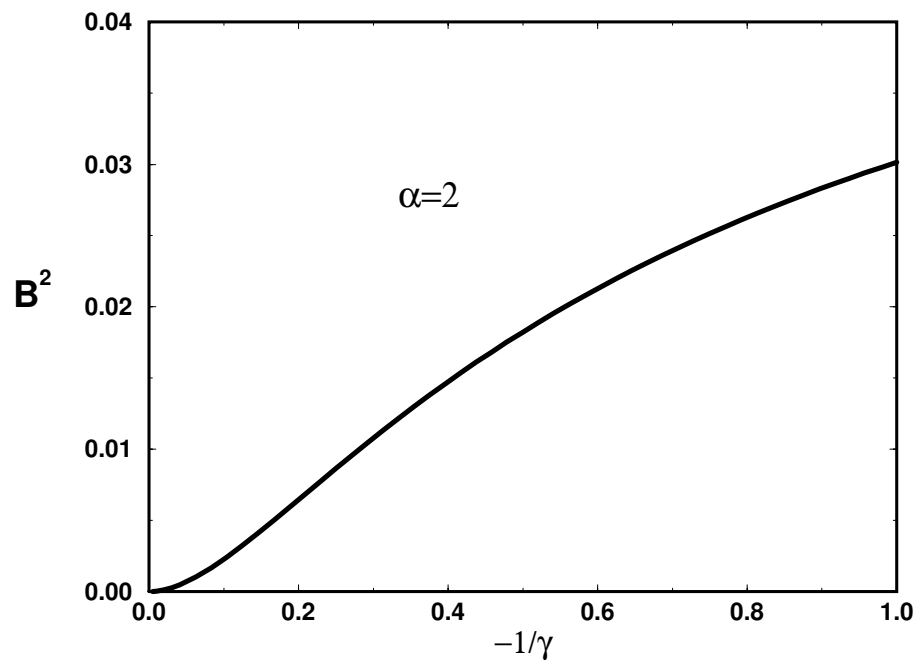
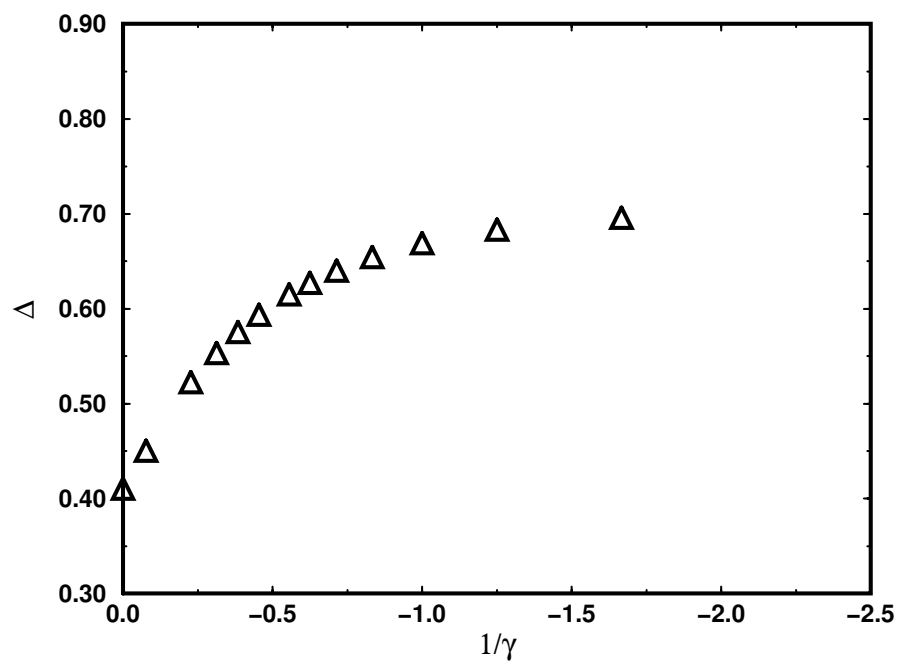
$$\begin{aligned} \Delta_{\gamma \rightarrow -\infty}^{(1)}(k) &= 2\Delta_{\gamma \rightarrow -\infty}^{(0)}(k) = \\ &\lambda_k^{\gamma \rightarrow -\infty} + \frac{1}{\lambda_k^{\gamma \rightarrow -\infty}} \left(-\frac{2}{3} \cos^2(k) - \frac{2}{9} \cos(k) + \frac{8}{27} \right) \end{aligned} \quad (1.99)$$

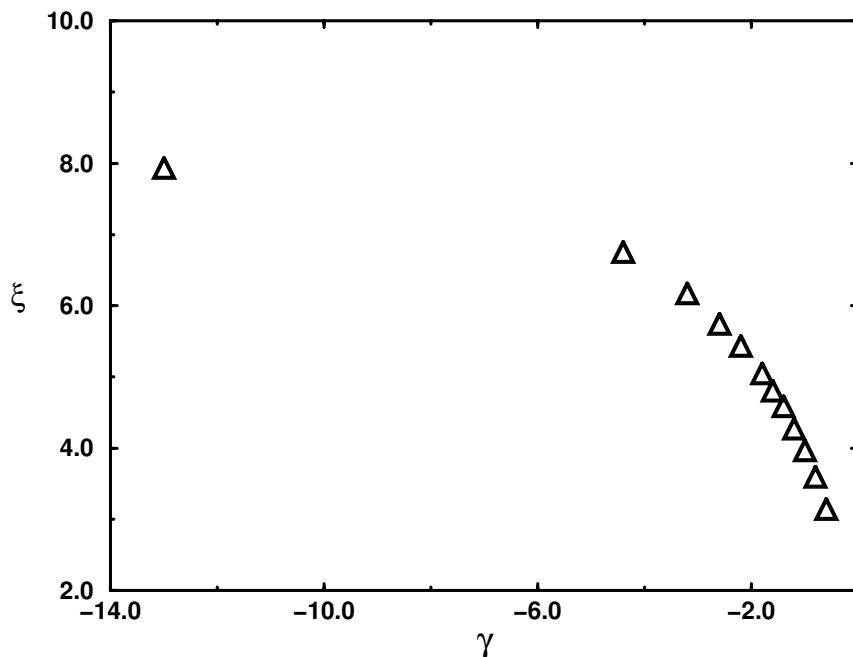
$$\Delta_{\gamma \rightarrow -\infty}^{(2)}(k) = 0 \quad (1.100)$$

$$\lambda_k^{\gamma \rightarrow -\infty} = \frac{10}{9} + \frac{2}{3} \cos(k) \quad (1.101)$$

und damit die Resultate von [60].

Betrachtet man zusätzlich dazu die Graphen in den Abbildungen 1.4 - 1.6, so ergibt sich ein geschlossener Pfad vom dimerisierten Punkt zum Haldanepunkt. Die langsame Variation der physikalischen Größen entlang diesen Pfades durch

Abbildung 1.14: Singletgewicht $\alpha = 2$ Abbildung 1.15: Anregungsenergie (Δ) $\alpha = 2$

Abbildung 1.16: Korrelationslänge $\alpha = 2$

das Phasendiagramm offenbart die Ähnlichkeit der Haldanephase und der Dimerphase im vorliegenden Bild.

Die Extrapolation zum Limes $\gamma \rightarrow -\infty$ ist analog zu White [43] mit einem Fit von $E_0/L - (1 + \gamma)/4$ an ein Polynom vierten Grades für die Punkte $\alpha = 2$, $\gamma = -2.2, -2.6, -3.2, -4.4, -13$ durchgeführt worden (Tabelle 1.4).

Die erhaltenen Werte für die Grundzustandsenergie und die Anregungslücke im Grenzfall des $S = 1$ HAFM

$$\frac{1}{J_{eff}} \left(\frac{E_0}{L} - \frac{1 + \gamma}{4} \right) \approx -1.4069 \quad (1.102)$$

$$\frac{1}{J_{eff}} \Delta \approx 0.4106 \quad (1.103)$$

sind in hervorragender Übereinstimmung mit den bekannten Resultaten.

Die analoge Extrapolation der Korrelationslänge (Abbildung 1.16) zeigt ein monotonen Ansteigen. Der erhaltenen Wert ist größer als der akzeptierte Wert ($\xi \approx 6.2$). Eine Übereinstimmung ist aber aufgrund der unterschiedlichen Vorgehensweise und der etwas unterschiedlichen Berechnung der Korrelationslänge auch nicht zu erwarten.

Grundzustandsenergie						
$\gamma =$	$N = 12$	$N = 16$	$N = 20$	$N = 24$	$N = 28$	$N \rightarrow \infty$
-1.0	-1.168874	-1.160406	-1.157719	-1.156744	-1.156363	-1.156040
-2.2	-1.442089	-1.431225	-1.427342	-1.425759	-1.425061	-1.424292
-2.6	-1.536390	-1.525068	-1.520950	-1.519238	-1.518469	-1.517594
-3.2	-1.679514	-1.667673	-1.663286	-1.661423	-1.660568	-1.659544
-4.4	-1.969666	-1.957152	-1.952409	-1.950343	-1.949366	-1.948138
-13.0	-4.095278	-4.081498	-4.076053	-4.073567	-4.072326	-4.070566
$\gamma \rightarrow -\infty$						$-(\gamma + 1)/4 - 0.52759$
Anregungsenergie						
-1.0	0.626569	0.557398	0.528107	0.514784	0.508496	0.501711
-2.2	0.605725	0.527135	0.489590	0.470340	0.460095	0.445421
-2.6	0.600401	0.519686	0.480410	0.459877	0.448724	0.431682
-3.2	0.593758	0.510573	0.469294	0.447250	0.435003	0.415168
-4.4	0.583965	0.497512	0.453582	0.429489	0.415715	0.391956
-13.0	0.559096	0.466436	0.417295	0.389032	0.371958	0.337796
$\gamma \rightarrow -\infty$						0.30797

Tabelle 1.4 Entwicklung der Grundzustandsenergie und Anregungsenergie im Limes $\gamma \rightarrow -\infty$ und $\alpha = 2$.

Die numerischen Resultate sind in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der MP-Rechnungen. Auf einem Weg durch das Phasendiagramm variieren die betrachteten Größen E_0 , ξ , Δ stetig und langsam. Dies unterstreicht die Hypothese, daß die verschiedenen Modelle, Dimer-, MG- und Haldanemodell, alle in derselben Phase liegen. Die Energielücken in den verschiedenen Grenzfällen und auch in der regulären Spinleiter scheinen nur quantitativ unterschiedlich zu sein und verschiedene Realisierungen eines einzigen, zugrunde liegenden Quantenkondensationsphänomens.

Kapitel 2

Thermodynamische Größen der Spinleiter

Mit den bisher vorgestellten Verfahren war es möglich, das niedrig liegende Spektrum und die zugehörigen Wellenfunktionen, die Korrelationsfunktionen und lokale Magnetisierung zu bestimmen, entweder exakt für endliche Systeme oder näherungsweise im Rahmen der MP-Beschreibung.

Eine Bestimmung der thermodynamischen Eigenschaften für endliche Temperaturen ist bisher verblieben, da die Eigenzustände numerisch nur für sehr kleine Systeme in der nötigen Anzahl und analytisch überhaupt nicht bestimmt werden könnten.

Analytische Beschreibungen im Rahmen der Feldtheorie ($NL\sigma M$) und Renormierungsgruppen-Rechnungen [66, 20, 21] sind in der Lage, die kritischen Exponenten der thermodynamischen Zustandsgrößen zu bestimmen. Dies ist auf der kritischen Linie von [20, 67] durchgeführt worden.

Quanten-Monte-Carlo Verfahren sind eine Möglichkeit numerische Resultate für auch experimentell wichtige thermodynamische Größen, wie den statischen Strukturfaktor, zu erhalten. Schwierigkeiten entstehen hier jedoch durch frustrative Effekte, die zum Vorzeichenproblem führen. In dem Phasendiagramm der verallgemeinerten Spinleiter sind nicht frustrierte Systeme nur unterhalb von $\gamma = -1$ und auf der Linie $\alpha = 0$ zu finden. Somit entzieht sich auch der gesamte Bereich auf der kritischen Linie und eben speziell die Spin-Peierls-Substanz CuGeO_3 dem Zugriff der Quanten-Monte-Carlo Rechnungen.

Hier soll nun ein numerisches Verfahren vorgestellt werden, das für kleine Systeme eine Näherungsbeschreibung der Zustandsdichte, der Zustandssumme, der Magnetisierung, der Suszeptibilität und der spezifischen Wärme liefert [39].

Die Rechnungen sind für $N = 8$ durchgeführt worden, um die Resultate mit denen aus exakten Diagonalisierungen zu vergleichen.

Daraufhin sind die Rechnungen auf größere Systeme ($N = 16, 20, 24$) ausgeweitet worden. Im Dimer-Fall konnten die Resultate ($N = 16$) mit analytischen Ausdrücken verglichen werden.

Außer dem Fall des total dimerisierten Systems sind Ergebnisse für den $S = 1/2$ HAFM und die reguläre Spinleiter berechnet und mit Quanten-Monte-Carlo Ergebnissen und experimentellen Resultaten sowie Bethe-Ansatz Rechnungen ($S = 1/2$ HAFM) verglichen worden.

Schließlich sind auf der kritischen Linie zwei frustrierte Systeme untersucht worden, zum einen das konforme Modell und zum anderen das Modell ($\alpha = 0.70 \pm 0.1$ [68]), das die Spin-Peierls Substanz CuGeO_3 beschreiben soll.

2.1 Kernpolynomverfahren

Ziel des Verfahrens ist es, die genäherte Zustandsdichte $D(\epsilon)$ eines Systems mit gegebener Hamiltonscher Matrix (H) der Dimension $N \times N$ zu bestimmen.

$$D(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(\epsilon - \epsilon_n) \quad (2.1)$$

Im weiteren Verlauf sind der minimale (ϵ_l) und der maximale (ϵ_u) Energieeigenwert des Hamiltonoperators zu bestimmen, wodurch man eine reskalierte Hamiltonsche Matrix (X) erhält.

$$H = cX + d \quad (2.2)$$

mit

$$c = \frac{\epsilon_u - \epsilon_l}{2} \quad d = \frac{\epsilon_u + \epsilon_l}{2}.$$

Alle Eigenwerte von X liegen somit im Intervall $[-1,1]$.

Mit der Zustandsdichte $D(x)$ sei im folgenden immer die Zustandsdichte des reskalierten Systems gemeint. Diese sei in eine Reihe orthogonaler Polynome entwickelbar.

$$D(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(x - x_n) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m P_m(x) \quad (2.3)$$

Prinzipiell ist jede orthogonale Polynomentwicklung denkbar. Hier sind Legendre-Polynome gewählt worden. N ist die Anzahl der Zustände.

$$P_0(x) = 1$$

$$\begin{aligned} P_1(x) &= x \\ (n+1)P_{n+1}(x) &= (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Außerdem gilt für die Ableitungen der Legendre–Polynome

$$\frac{d}{dx}P_n(x) = \frac{n}{x^2-1} (xP_n(x) - P_{n-1}(x)). \quad (2.5)$$

Die Orthogonalität der Legendre–Polynome folgt aus

$$\int_{-1}^1 dx P_m(x) P_n(x) = \frac{2}{2m+1} \delta_{nm}. \quad (2.6)$$

Zur Bestimmung der Zustandsdichte ist es notwendig, die Entwicklungskoeffizienten a_n zu bestimmen. Es ergibt sich

$$a_n = \frac{2}{2n+1} \int_{-1}^1 dx D(x) P_n(x) \equiv \frac{2}{2n+1} \mu_n. \quad (2.7)$$

Die etwas willkürlich eingeführten “Momente” μ_n stellen, wie sich noch zeigen wird, die zentrale Größe dieses Verfahrens dar.

Um thermodynamische Größen ausrechnen zu können, ist die Zustandssumme des Systems zu bestimmen.

$$\mathcal{Z} \equiv N \int_{\epsilon_l}^{\epsilon_u} d\epsilon e^{-\beta(\epsilon-\epsilon_l)} D(\epsilon) \quad (2.8)$$

oder unter Verwendung der reskalierten Variablen

$$\mathcal{Z} \equiv N \int_{-1}^1 dx e^{-c\beta(x+1)} D(x) = N e^{-c\beta} \int_{-1}^1 dx e^{-c\beta x} D(x) \quad (2.9)$$

Die Exponentialfunktion kann wiederum nach einem vollständigen Satz orthogonaler Polynome entwickelt werden.

$$e^{-\beta cx} = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1)(-1)^m I_{m+1/2}(c\beta) P_m(x) \quad (2.10)$$

Damit ergibt sich für die Zustandssumme

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= N e^{-c\beta} \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{1}{c\beta}} (2m+1)(-1)^m I_{m+1/2}(c\beta) \underbrace{\int_{-1}^1 dx P_m(x) D(x)}_{\mu_m} \\ &= N e^{-c\beta} \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{1}{c\beta}} (2m+1)(-1)^m I_{m+1/2}(c\beta) \mu_m. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Die $I_{n+1/2}(x)$ sind die halbzahligen modifizierten Besselfunktionen. Bei der expliziten Auswertung wird die Reihe bei einem bestimmten $m = M$ abgebrochen.

$$\mathcal{Z}^M = N e^{-c\beta} \sum_{m=0}^M \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{1}{c\beta}} (2m+1) (-1)^m I_{m+1/2}(c\beta) \mu_m \quad (2.12)$$

Damit reduziert sich die Bestimmung der thermodynamischen Größen auf die Berechnung der Momente $\mu_n, n = 0, \dots, M$.

2.1.1 Stochastische Berechnung

Bei der Betrachtung der Definition der Momente

$$\mu_m = \int_{-1}^1 dx D(x) P_m(x) \quad (2.13)$$

stellt man fest, daß diese auch als Erwartungswert der operatorwertigen Funktion $P_m(X)$ interpretiert werden können.

$$\mu_m = \frac{1}{N} \text{Tr}\{P_m(X)\} \quad (2.14)$$

Zur Berechnung dieses Erwartungswertes werden gaußverteilte Zufallsvektoren benutzt.

$$|G(j)\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n(j) |n\rangle. \quad (2.15)$$

Der Satz von Vektoren $\{|n\rangle\}$ bildet eine Unterraumbasis des Hilbertraums des Hamiltonoperators H bzw. X . Die a_k sind die Komponenten eines N -dimensionalen Zufallsvektors \vec{a} und sind gaußverteilt mit Varianz "1" gemäß

$$P[\vec{a}] = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{\vec{a}^\dagger \vec{a}}{2}}. \quad (2.16)$$

Eine effiziente Prozedur zur Berechnung einer Näherung für die Momente ist

$$\tilde{\mu}_m = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \langle G(j) | P_m(X) | G(j) \rangle, \quad (2.17)$$

wobei J die Anzahl der verwendeten Zufallsvektoren ist. Das Matrixprodukt lautet dann

$$\langle G(j)|P_m(X)|G(j)\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |a_n(j)|^2 \langle n|P_m(X)|n\rangle \quad (2.18)$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{n \neq n'=1}^N a_n(j)a_{n'}(j) \langle n|P_m(X)|n'\rangle. \quad (2.19)$$

Die Eigenschaft der Gaußverteilung gewährleistet, daß der Erwartungswert des Vorfaktors im Diagonalteil gegen eins strebt und im Außerdiagonalteil gegen null.

Die Rekursionrelation der Legendre–Polynome liefert

$$\begin{aligned} P_0(X)|G(j)\rangle &= |G(j)\rangle & (2.20) \\ P_1(X)|G(j)\rangle &= X|G(j)\rangle \\ P_{n+1}(X)|G(j)\rangle &= \frac{2n+1}{n+1} X P_n(X)|G(j)\rangle - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(X)|G(j)\rangle \end{aligned}$$

und somit für die Momente

$$\tilde{\mu}_n = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \langle G(j)|P_n(X)|G(j)\rangle. \quad (2.21)$$

Hier bemerkt man den Bezug zur exakten Diagonalisierung mittels Lanczos–Verfahren, da der zentrale Punkt in dem dortigen Verfahren die Konstruktion einer Basis und die Programmierung einer Matrix–Vektor Multiplikation ist. Damit kann man die Programme zur exakten Diagonalisierung mit wenigen Änderungen zur Erzeugung von Momenten nutzen.

2.2 Ergebnisse

Es wurde die Zustandsdichte für ein kleines System ($N=8$) berechnet und mit der exakten verglichen, wobei sich eine hervorragende Übereinstimmung ergab.

Dieselbe Übereinstimmung ergab sich bei dem Vergleich der Resultate der Nullfeldsuszeptibilität des vollständig dimerisierten Modells für Systemlängen $N = 16$ und $N = 24$ mit den analytisch bestimmten Ergebnissen (Abbildung 2.1). Die Bestimmung der Zustandssumme im vollständig dimerisierten Modell

ist trivial, da es sich um wechselwirkungsfreie Zweizustandssysteme handelt. Die Kopplungsstärke J ist eins gesetzt.

$$\chi_{H \rightarrow 0}^D = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial H^2} \ln \mathcal{Z} \quad (2.22)$$

mit

$$\mathcal{Z} = [1 + e^{-\beta} (1 + 2 \cosh(\beta \mu H))]^{N/2}, \quad (2.23)$$

und somit folgt für die Nullfeldsuszeptibilität

$$\chi_{H \rightarrow 0}^D = N \beta \mu (e^\beta + 3)^{-1}. \quad (2.24)$$

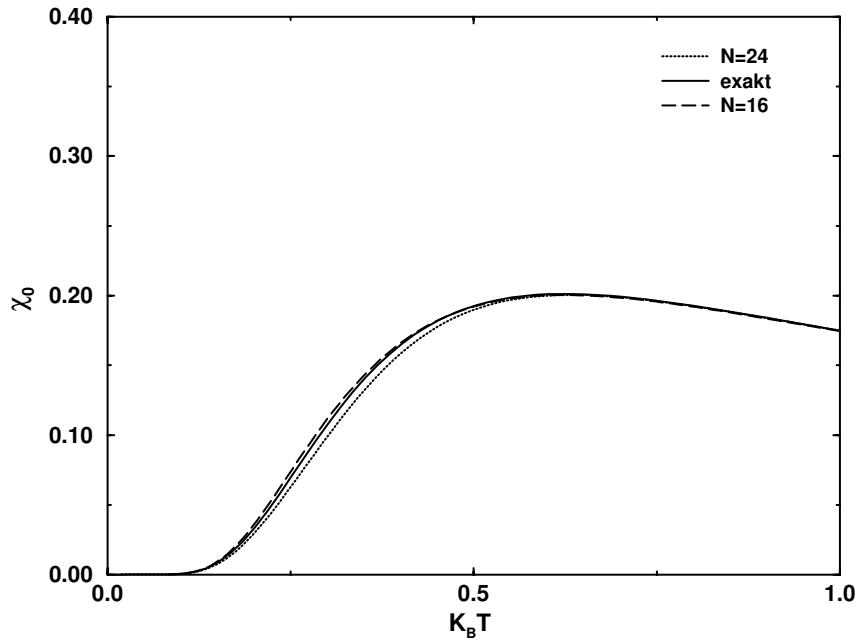


Abbildung 2.1 Die Nullfeldsuszeptibilität pro Spin für das dimerisierte Modell ($N=16,24$), verglichen mit exakten Daten.

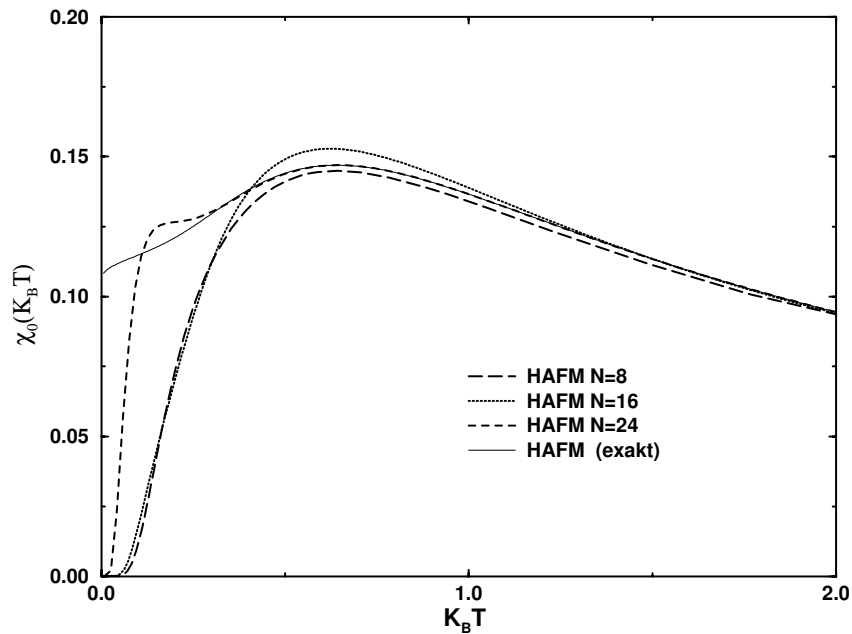


Abbildung 2.2 Die Nullfeldsuszeptibilität für den Heisenberg-Antiferromagnet ($N=8,16,24$) verglichen mit exakten Resultaten.

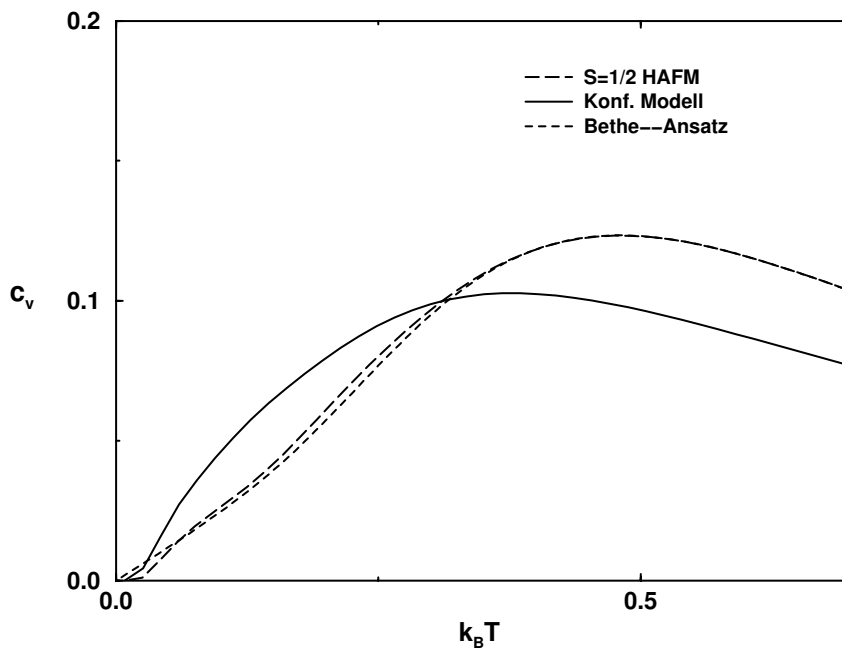


Abbildung 2.3 Die spezifische Wärme für den Heisenberg-Antiferromagnet ($N=24$) verglichen mit exakten Resultaten und für das konforme Modell.

Als weiteren Test ist die Nullfeldsuszeptibilität (Abbildung 2.2) und die spezifische Wärme (Abbildung 2.3) des $S = 1/2$ HAFM berechnet und mit exakten Resultaten aus Bethe–Ansatz Rechnungen von Klümper [69] verglichen worden. Dabei sind die Suszeptibilität und die spezifische Wärme analytisch aus den Ableitungen der Zustandssumme als Funktional abhängig von den Momenten bestimmt worden.

Ebenso wie die Nullfeldsuszeptibilität des $S = 1/2$ HAFM mit exakten Resultaten kontrolliert wurde, ist die der regulären Spinleiter mit Ergebnissen aus Monte–Carlo–Rechnungen verglichen worden (Abbildung 2.4).

Infolge der endlichen Dimensionen der hier benutzten Systeme existiert in jedem Fall eine Anregungslücke. Daher zeigt die Nullfeldsuszeptibilität immer ein exponentielles Tieftemperaturverhalten mit einer Aktivierungstemperatur, die modellabhängig ist. Oberhalb dieser Temperatur verschwinden die Korrekturen der endlichen Systemgröße, und die Ergebnisse entsprechen denen des thermodynamischen Limes.

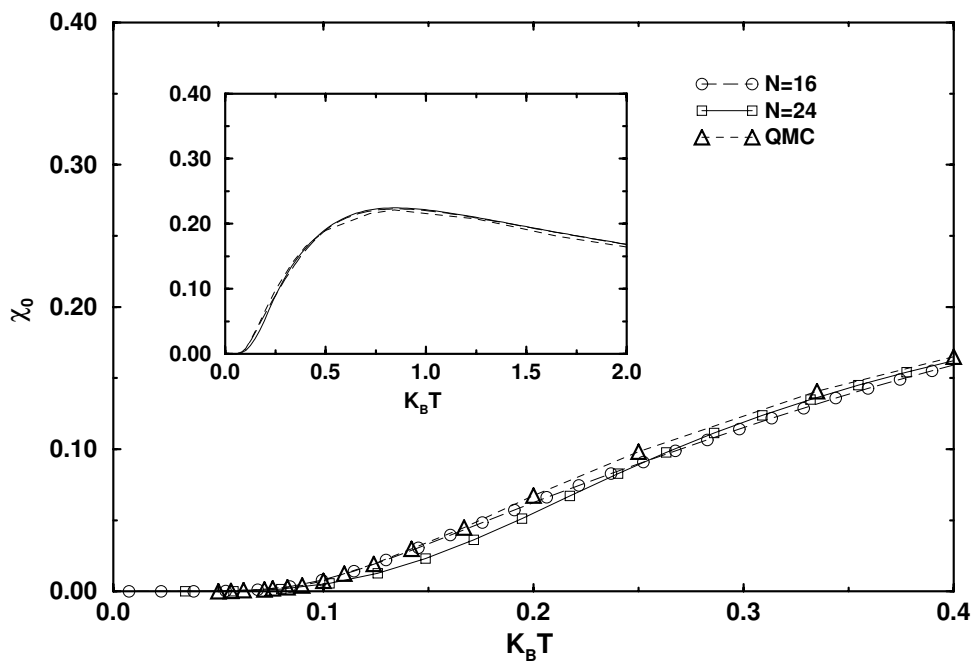


Abbildung 2.4 Die Nullfeldsuszeptibilität für die reguläre Spinleiter ($N=16,24$), verglichen mit Quanten–Monte–Carlo Daten.

Es zeigt sich, daß das Kernpolynomverfahren für Systeme mit einer Anregungslücke und kleiner Korrelationslänge die verlässlichsten Ergebnisse bis zu kleinsten Temperaturen liefert. Die kritische Temperatur, bis zu der die erhaltenen Ergebnisse mit dem thermodynamischen Limes übereinstimmen, hängt von dem finite-size Verhalten der Anregungslücke ab.

$$\Delta(L) = \Delta_{\infty}(L) + \alpha \frac{e^{-N/\xi}}{N^2}$$

Je kleiner die Korrelationslänge desto eher zeigt das endliche System das Verhalten des unendlichen Systems.

Systeme wie das Majumdar–Ghosh–Modell und die reguläre Spinleiter besitzen kleine Korrelationslängen und große Anregungslücken und stellen daher gute Kandidaten für das Kernpolynomverfahren dar.

Die Beschreibung von Systemen, die im thermodynamischen Limes keine Anregungslücke und algebraische Korrelationen besitzen, ist deutlich schlechter, da die kritische Temperatur, bei der sich die Anregungslücke des endlichen Systems bemerkbar macht, erheblich größer ist. Bei dem $S = 1/2$ HAFM beträgt die Anregungslücke selbst bei 24 Spins immer noch $\approx 0.3J$, so daß eine verlässliche Beschreibung der Suszeptibilität nur unwesentlich über den mean-field Bereich hinausgeht. Die Ergebnisse für die spezifische Wärme sind jedoch deutlich besser. Die erwartete lineare Temperaturabhängigkeit für tiefe Temperaturen wird mit der korrekten Steigung ($1/3$ aus Bethe–Absatz Rechnungen) wiedergegeben.

Da bei nicht frustrierten Systemen die thermodynamischen Größen mittels Monte-Carlo-Verfahren bestimmt werden können, wird hier der Bereich der frustrierten Spinleiter und speziell des massiven Teils der kritischen Linie betrachtet. Es soll die Vermutung untersucht werden, daß die Spin–Peierls Substanz CuGeO_3 bei $\gamma = 0, \alpha = 0.7$ einzuordnen ist [68, 70]. Dazu bestimmt man die Suszeptibilität (Abbildung 2.5 und 2.6) durch das Kernpolynomverfahren und vergleicht sie mit experimentellen Resultaten [71].

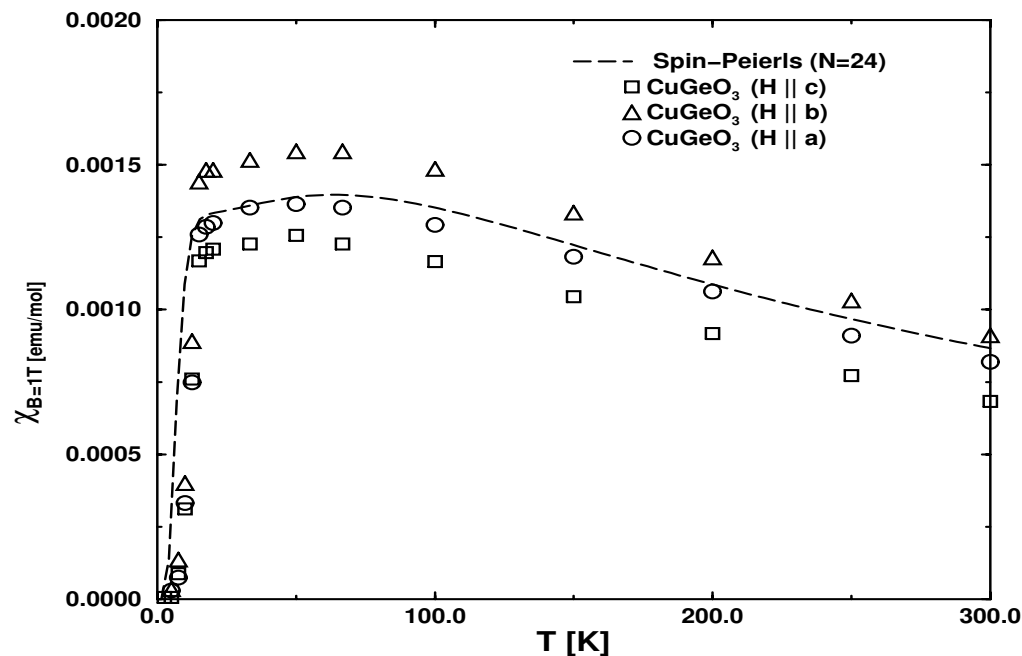


Abbildung 2.5 Die Suszeptibilität ($B=1T$) für $\alpha = 0.7, \gamma = 0$ ($N=24$), verglichen mit experimentellen Daten für CuGeO_3 .

Die mittels des Kernpolynomverfahrens gewonnene Suszeptibilität liefert qualitativ gute Ergebnisse für höhere Temperaturen. Der einzige Fitparameter ist die Stärke der Austauschkopplung, die nach Bouzerar et al. mit $J=160\text{K}$ [70] angenommen wurde. Die Achsen c, b und a beschreiben den Kristall, wobei c die Richtung der direkt benachbarten Cu^{2+} -Ionen ist, b die der wesentlich schwächer gekoppelten übernächsten Nachbarn und a die dritte Richtung in der orthorhombischen Einheitszelle. Die Unterschiede in der gemessenen Suszeptibilität bei verschiedenen Orientierungen des Magnetfeldes rühren von dem anisotropen g -Faktor her. Die Abweichungen des g -Faktors in a und b Richtung sind jedoch hier nicht berücksichtigt worden.

Die Abweichungen bei der Beschreibung des Niedertemperaturbereichs sind einerseits auf die Endlichkeit des Systems und das damit verbundene diskrete, niedrig liegende Spektrum zurückzuführen. Andererseits gibt es Anzeichen dafür, daß eine Kopplung übernächster Nachbarn alleine zur Erklärung nicht ausreicht,

da auch die Anisotropien bei verschiedenen Magnetfeldrichtungen damit nicht zu erklären sind. Bei 14K führt CuGeO_3 einen strukturellen Phasenübergang durch. Dieser Effekt kann in dem vorgestellten Modell ebenfalls nicht beschrieben werden. Eine zusätzliche alternierende Kopplung wäre jedoch in der Lage eine Dimerisierung unterhalb einer kritischen Temperatur zu initiieren. Die Stärke einer solche Kopplung festzustellen wäre eine mögliche Anwendungsweise des vorgestellten Verfahrens.

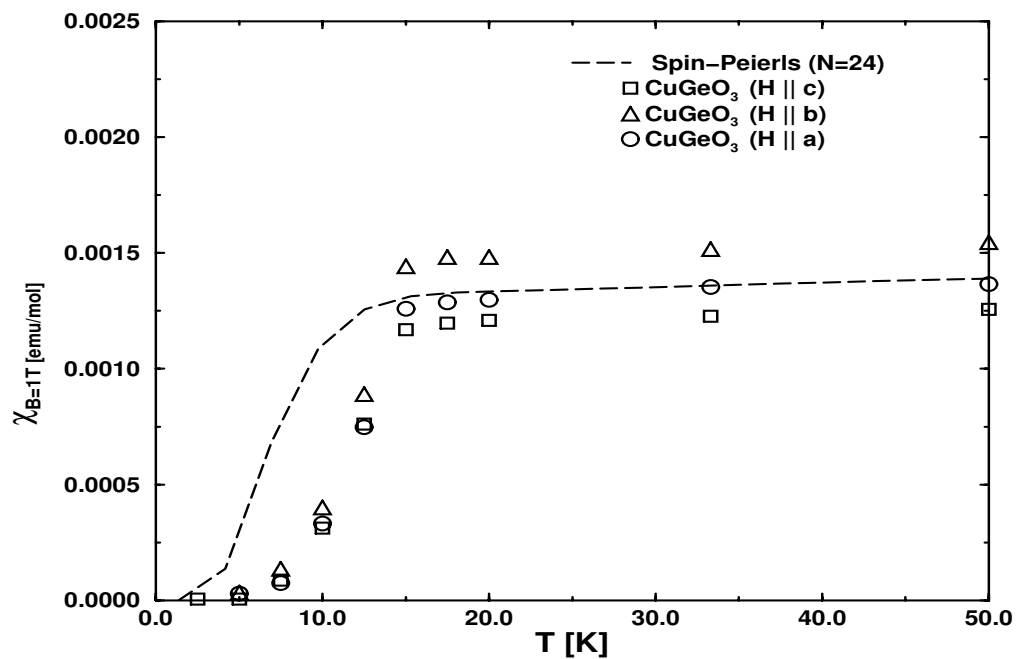


Abbildung 2.6 Die Suszeptibilität ($B=1\text{T}$) für $\alpha = 0.7, \gamma = 0$ ($N=24$), verglichen mit experimentellen Daten für CuGeO_3 (Niedertemperaturbereich).

Kapitel 3

Verunreinigungen in Spinleitern

3.1 Einleitung

Aufgrund der großen Evidenz, daß die reguläre Spinleiter in derselben Phase liegt wie der $S = 1$ HAFM, die Haldanekette [43], ist es naheliegend, analog zum Haldanesystem auch in der Spinleiter die Effekte von Verunreinigungen zu untersuchen, zumal die Betrachtung von Verunreinigungen in der Haldanekette stark zum Verständnis des Systems beigetragen hat.

Das AKLT-Modell, genauer der VBS-Charakter des Grundzustandes, machte Voraussagen über die Effekte von unmagnetischen Verunreinigungen. An den Enden der durch die Verunreinigungen getrennten Segmente sollten quasifreie $S = 1/2$ Spins existieren.

Die Vorhersage dieser quasifreien Endspins durch das AKLT-Modell [2] wurde in Elektronenspinresonanz-(ESR)-Experimenten an einer mit Zink dotierten quasi eindimensionalen, organischen Substanz mit isotroper Kopplung der benachbarten Spins ($S = 1$) (NENP) [40] bestätigt .

Bei der Betrachtung unmagnetischer Verunreinigungen in Spinleitern zeigen sich Gemeinsamkeiten mit dem Haldanefall ebenso wie Unterschiede.

Der wesentliche Unterschied beruht auf dem Effekt der Verunreinigungen auf die Geometrie des Modells. Im Gegensatz zum $S = 1$ HAFM führen sie nicht zu einem Bruch der Leiter, sondern etablieren Regionen schwacher Kopplung. Der ungepaarte Spin $S = 1/2$ gegenüber der Verunreinigung verbindet die angrenzenden regulären Leiterstrukturen.

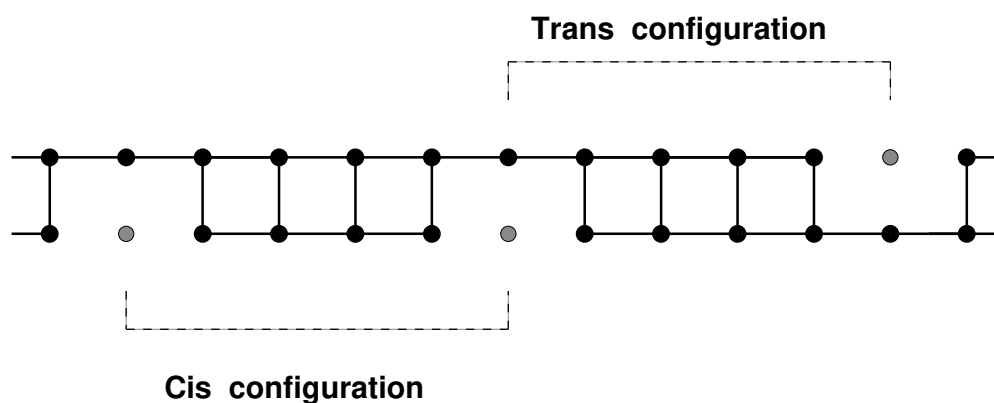


Abbildung 3.1 Eine typische Leiterkonfiguration mit Verunreinigungen

Zusätzlich motiviert wurden diese Untersuchungen durch Messungen an der mit Zink dotierten Leitersubstanz SrCu_2O_3 [72, 73]. Dort wurde ein Verschwinden der Anregungslücke bei Erhöhung der Zinkkonzentration beobachtet.

Im folgenden werden analytische und numerische Betrachtungen der regulären isotropen Spinleiter mit unmagnetischen Verunreinigungen vorgestellt. Die untersuchten Größen sind die Grundzustandsenergie, die niedrigliegenden Anregungen und die lokale Magnetisierung sowie der statische Strukturfaktor für $T = 0$.

Dabei werden numerische und analytische Untersuchungen für zwei ungepaarte Spins $S = 1/2$ in cis- oder trans-Konfiguration an den Enden einer offenen Leiter mit p vollständigen Sprossen gezeigt.

Es werden weiterhin Resultate für zwei Verunreinigungen in verschiedenen Abständen und Konfigurationen aus MP-Rechnungen und exakten Diagonalisierungen endlicher Systeme vorgestellt.

Die Beschreibung des niederenergetischen Spektrums durch ein effektives Modell mit statistisch verteilten Kopplungsstärken (effektives Paarmodell) [74] wird untersucht. Zur quantitativen Analyse größerer Systeme werden Resultate aus DMRG-Rechnungen zitiert [75] und dem Spektrum des effektiven Paarmodells gegenübergestellt.

Ebenso werden die Auswirkungen der Resultate auf die thermodynamischen Größen bei statistischer Verteilung der Verunreinigungen diskutiert, sowohl den Abstand (p vollständige Sprossen) betreffend als auch die relative Position auf den Holmen.

Die Wahrscheinlichkeit des Vorhandenseins zweier Verunreinigungen auf einer einzigen Sprosse und damit des Bruchs der magnetischen Struktur der Leiter ist proportional zum Quadrat der Verunreinigungsdichte. Da hier nur geringe Dichten betrachtet werden sollen, bleiben derartige Effekte unberücksichtigt.

Es sind exakte Diagonalisierungen mittels Lanczos–Technik für endliche Systeme mit bis zu 12 vollständigen Sprossen (p) ($N = 2p + 2$) mit periodischen und offenen Randbedingungen durchgeführt worden. Offene Randbedingungen sind bei Systemen mit zwei ungepaarten Randspins $S = 1/2$ und variierender Länge angenommen worden, periodische Randbedingungen für Systeme mit zwei Verunreinigungen in variierender Entfernung für $p = 11, 12$ Sprossen. Die Translationsinvarianz wird durch die Defekte zerstört.

Für die ungestörte Spinleiter reduziert die Projektion auf die irreduziblen Darstellungen der korrespondierenden Symmetriegruppen (Reflexion-, Spiegelungs-, $SU(2)$ –Symmetrie) die Basisgröße in den Unterräumen drastisch. Die Verunreinigungen zerstören jedoch diese Symmetrien, und es bleibt nur die Isotropie des Modells und damit die $SU(2)$ –Invarianz. Auch hier sind die Rechnungen auf der CRAY T3D 256 des ZIB Berlin durchgeführt worden.

Die DMRG–Rechnungen für Systeme mit 2×50 bis 2×100 Spins und bis zu sechs Defekten im Inneren sind von Ulrich Schollwöck durchgeführt worden und die Resultate werden aus [75] zitiert.

3.2 Konsequenzen des Lieb–Mattis–Theorems

Ein Spinsystem besteht aus wechselwirkenden Spins, die aufgrund der Wechselwirkungen so angeordnet werden können, daß sie auf den Kreuzungspunkten eines zugrunde liegenden Gitters lokalisiert sind.

Wenn weiterhin das Gitter in zwei Untergitter aufgeteilt werden kann, so daß es keine Wechselwirkungen innerhalb des Untergitters und nur antiferromagnetische, isotrope Wechselwirkungen zwischen ihnen gibt, macht das Lieb–Mattis–Theorem eine Aussage über den Gesamtspin des Grundzustandes.

$$S_{tot} = |N_A S_A - N_B S_B| \quad (3.1)$$

$N_{A/B}$ ist die Anzahl der Spins $S_{A/B}$ dem Untergitter A/B .

Eine Spinleiter mit $2L$ Plätzen soll N (N gerade) Verunreinigungen besitzen. Im Grundzustand der verbleibenden $(2L-N)$ $S = 1/2$ Spins kann S_{tot} entsprechend der Verteilung der Defekte auf den Untergittern Werte zwischen 0 und $N/2$ annehmen. Wenn sich $N/2$ Defekte auf jedem Untergitter befinden, liegt der Grundzustand im $S_{tot} = 0$ Sektor. Im anderem Extrem aller Defekte auf einem einzigen Untergitter liegt der Grundzustand im $S_{tot} = (L/2 - 1/2(L-N)) = N/2$ Sektor. Bei Konfigurationen mit zwei Defekten auf einer Sprosse wird die magnetische Struktur der Leiter zerbrochen, und es gibt mehrere entartete Grundzustände mit verschiedenen Werten des Gesamtspins (S_{tot}).

Für eine Zufallsverteilung von Defekten ist die Wahrscheinlichkeit ($g(S_{tot})$), einen Grundzustand mit bestimmtem S_{tot} zu erhalten, durch

$$S_{tot} = 0 \quad g(S_{tot}) = \binom{N}{N/2} \quad (3.2)$$

$$S_{tot} > 0 \quad g(S_{tot}) = 2 \binom{N}{N/2 - S_{tot}} \quad (3.3)$$

gegeben.

Für $N \gg 1$ erhält man durch Anwendung der Stirlingformel die relativen Gewichte der Grundzustände mit gegebenem S_{tot} (2^N Zustände infolge der Verunreinigungen).

$$\frac{g(S_{tot} = 0)}{2^N} = \sqrt{\frac{2}{\pi N}}, \quad \frac{g(S_{tot} = 1)}{2^N} = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi N}}. \quad (3.4)$$

Die größte Wahrscheinlichkeit hat ein Grundzustand mit $S_{tot} = 1$. Die Momente des Spins des Grundzustandes für eine statistische Verteilung der Defekte ergeben sich unter Benutzung von Gleichung 3.3 zu

$$\begin{aligned} \langle S_{tot} \rangle &= \sum_{n=1}^{N/2} \frac{n(N)!}{(N/2 - n)!(N/2 + n)!} \\ &= \frac{N}{4} \frac{N!}{((\frac{N}{2})!)^2} \\ \langle S_{tot}^2 \rangle &= \sum_{n=1}^{N/2} \frac{n^2(N)!}{(N/2 - n)!(N/2 + n)!} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4} \frac{N! \sqrt{\pi} \Gamma(\frac{N}{2} + 2)}{(N/2 - 1)! (N/2 + 1)! \Gamma(\frac{N}{2} + \frac{1}{2})}$$

Mit Hilfe der Stirlingformel erhält man schließlich

$$\langle S_{tot} \rangle = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \quad (3.5)$$

$$\langle S_{tot}^2 \rangle = \frac{N}{4}. \quad (3.6)$$

Diese Ergebnisse sind bereits früher von [74] durch ein random-walk Argument erhalten worden. Es zeigt sich jedoch, daß es sich um eine exakte Konsequenz des Lieb-Mattis Theorems handelt. In der Diskussion der Tieftemperatursuszeptibilität soll S_0 der Spin des Grundzustandes sein und S_α , $\alpha = 1, \dots, \alpha_m = 2^N - 1$ der der übrigen Zustände. Der Tieftemperaturgrenzfall der Suszeptibilität bei verschwindendem Magnetfeld ist dann gegeben durch die paramagnetische Suszeptibilität (J : Gesamtdrehimpulsquantenzahl, \mathbf{J} : Gesamtdrehimpulsoperator)

$$\chi_{para} = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B T} J(J+1) = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B T} \langle \mathbf{J}^2 \rangle \quad (3.7)$$

mit $J = S_{tot}$ und $\langle \mathbf{J}^2 \rangle$ als thermischem Erwartungswert.

$$\langle \mathbf{J}^2 \rangle = \frac{\langle \sum_{p=0}^{\alpha_m} S_p^2 g_p e^{-\beta \Delta_p} \rangle}{\langle \sum_{p=0}^{\alpha_m} g_p e^{-\beta \Delta_p} \rangle}. \quad (3.8)$$

Damit folgt für die Tieftemperatursuszeptibilität

$$\chi = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B T} \frac{z(S_0) + \sum_{\alpha=1}^{\alpha_m} z(S_\alpha) e^{-\beta \Delta_\alpha}}{(2S_0 + 1) + \sum_{\alpha=1}^{\alpha_m} (2S_\alpha + 1) e^{-\beta \Delta_\alpha}}, \quad (3.9)$$

mit

$$z(S_\alpha) = 2 S_\alpha (S_\alpha + \frac{1}{2}) (S_\alpha + 1). \quad (3.10)$$

Wenn der Grundzustand kein Singlett ist ($S_0 > 0$), ist auch $Z(S_0) > 0$, und es ergibt sich für die Suszeptibilität ein Curie-Verhalten ($\chi \sim 1/T$) für $T \rightarrow 0$. Im Falle eines Singlettgrundzustandes ist $Z(S_0) = 0$, und die Suszeptibilität zeigt die für ein System mit endlicher Anregungslücke typische Eigenschaft einer Aktivierungstemperatur.

Wenn die Zustände mit einer asymptotischen Zustandsdichte der Form $\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{-\alpha}$ beginnen dicht zu liegen, verändert sich die Suszeptibilität zu $\chi(T) \sim T^{-\alpha}$. Für $\alpha = 0$ ergeben sich dann eine konstante Zustandsdichte und eine temperaturunabhängige Suszeptibilität (Fall des $S = 1/2$ HAFM).

Alle diese Abweichungen der Suszeptibilität von einem Curie-Verhalten erfordern einen Singlettgrundzustand. Dieser tritt jedoch für makroskopische Systeme mit geringerem Gewicht auf als der Tripletgrundzustand. Daraus kann geschlossen werden, daß die Nullfeldsuszeptibilität der verunreinigten Spinleiter im Tieftemperaturregime immer einem Curie-Gesetz gehorcht. Dies wird auch durch die Resultate von Renormierungsgruppenrechnungen bestätigt [76], die ebenfalls $\alpha = 1$ zeigen.

Bei der Berechnung der Curie-Konstanten auf der Basis des obigen Ausdrucks ist zu erkennen, daß infolge der Verunreinigungen eine Änderung des Erwartungswertes des Drehimpulsquadrates gegenüber dem effektiven $S = 1/2$ Modell auftritt.

$$S = \frac{1}{2} \quad : \quad S(S+1) = \frac{3}{4} \quad (3.11)$$

$$\text{eff. Modell} \quad : \quad \langle S^2 \rangle = \frac{1}{4} \quad (3.12)$$

Das experimentell interessante Verhalten bei endlichen Temperaturen beinhaltet diesen Übergang zwischen den beiden benachbarten Grenzbereichen. Es wird in hohem Maße durch die Zustandsdichte bestimmt, die jedoch nicht einfach zugänglich ist. Einige numerische Untersuchungen können zur Klärung in diesem Bereich beitragen.

3.3 Defekte am Rand offener Leitern

3.3.1 Numerische Resultate

Es werden Spinkonfigurationen mit p Sprossen und zwei Verunreinigungen betrachtet. Mittels exakter Diagonalisierung von Systemen mit $p \leq 12$ und zwei Defekten an den Leiterenden, offene Randbedingungen vorausgesetzt, sind die Grundzustandsenergien und die niedrig liegenden Anregungen bestimmt worden. Dabei handelt es sich um ein Singlett und ein Triplet, deren Reihenfolge durch die Position der Defekte auf den Untergittern bestimmt ist.

Laut Lieb-Mattis-Theorem ist der Grundzustand ein Singlett für zwei Defekte auf verschiedenen Untergittern und im anderen Fall ein Triplet. In dem Unter-

raum dieser beiden Zustände ist es nun möglich, die Aufspaltung als Folge einer effektiven Wechselwirkung zwischen den ungepaarten Randspins zu schreiben.

$$H_{\pm}^{(p)} = E_{0,\pm} + J_{eff,\pm}^{Rand}(p) \vec{S} \vec{S}'. \quad (3.13)$$

Der Index \pm bezieht sich auf das Vorzeichen von J_{eff} und unterscheidet zwischen antiferromagnetischer und ferromagnetischer Wechselwirkung. Die Daten zu $J_{eff}^{Rand,\pm}(p)$ aus Tabelle 3.1 sind in Abbildung 3.3 nochmals zur Verdeutlichung der Abstandsabhängigkeit dargestellt. $J_{eff}^{Rand,\pm}$ ist identisch mit der Anregungslücke.

J_{eff} (ED)		
Sprosse (n)	antiferromagnetisch	ferromagnetisch
2	0.4134342076	0.3332389325
3	0.2808007550	0.2790132929
4	0.1944368705	0.2010576140
5	0.1379125645	0.1459181428
6	0.0990135730	0.1051339920
7	0.0717149472	0.0759464504
8	0.0522047020	0.0549482466
9	0.0381181864	0.0398361954
10	0.0278774960	0.0289263601
11	0.0204037286	0.0210324667
12	0.0149374382	0.0153089483

Tabelle 3.1: Effektive Wechselwirkung aus ED.

Ein Test für die numerischen Daten ist die Extrapolation von E_0^{\pm} für $N \rightarrow \infty$. In diesem Limes sollten sich die Werte der ungestörten Leiter ergeben.

Es ergibt sich für $p \geq 5$

$$\begin{aligned} E_{0,+}(p) &= -1.157 p, \\ J_{eff,\pm}^{Rand}(p) &= J_{0,\pm} e^{-p/\xi}, \\ \text{mit } J_{0,+} &\approx 0.674, \quad J_{0,-} \approx 0.714, \quad \xi \approx 3.1. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Diese Daten sind an ein rein exponentielles Verhalten gefittet worden. Der mittlere quadratische Fehler ist kleiner als 10^{-6} für $J_{eff,\pm}$ und besser für $E_{0,+}$.

J_{eff} (DMRG)		
Sprosse (n)	antiferromagnetisch	ferromagnetisch
0	0.471	
1	0.398	0.249
2	0.255	0.170
3	0.181	0.154
4	0.126	0.115
5	0.090	0.087
6	0.065	0.064
7	0.047	0.047
8	0.034	0.035
9	0.025	0.025
10	0.018	

Tabelle 3.2: Effektive Wechselwirkung aus DMRG-Rechnungen.

Aufgrund der finite-size Effekte bei Leitern mit offenen Randbedingungen ist $E_{0,-}$ nicht mit ähnlicher Genauigkeit zu extrapolieren. Ein Verhalten wie in [74] vorausgesagt gemäß $e^{-p/\xi}/\sqrt{p}$, kann aufgrund des schlechteren Fits mit den vorliegenden Daten nicht verifiziert werden. Auch führt der beste mit “ $\sqrt{1/p}$ ” Verhalten zu erreichende Fit auf eine unangemessene Korrelationslänge ($\xi \approx 4$). Damit ähnelt die Situation der in der offenen Haldanekette [77].

3.3.2 Analytische Zugänge

MP-Beschreibung

Auch hier kann, wie bei der ungestörten Leiter, der MP-Ansatz eine gute Beschreibung von Defekten insbesondere in trans-Konfiguration liefern. Auf die Möglichkeit Defekte in cis-Konfiguration zu beschreiben, wird hier nicht eingegangen. Bei einem System mit zwei ungepaarten Spins in trans-Konfiguration im Abstand von p Sprossen wird der bekannte Ansatz mit den auf den Diagonalen definierten Matrizen $g^{(i)}$ benutzt.

$$|\psi\rangle_{\sigma,\sigma'} = \left[\prod_{j=1}^{p+1} g_j \right]_{\sigma,\sigma'}, \quad g_j = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_j + b|s\rangle_j & -a\sqrt{2}|t_+\rangle_j \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle_j & -(a|t_0\rangle_j - b|s\rangle_j) \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Der Wert von $b^2 = 1 - 3a^2$ ist durch die Minimierung der Energie gegeben. Für die numerischen Berechnungen wird der Wert für die unendlich lange reguläre Leiter ($b = 0.1736$) benutzt.

Die speziellen Grenzfälle des MP-Ansatzes sind nochmals kurz beschrieben:

- Für $a = b = 1/2$ ist der MP-Zustand einer der Grundzustände des Majumdar-Ghosh-Modells mit Singletts auf den Sprossen und freien Randspins.
- Für $b = 0, a = 1/\sqrt{3}$ ist der MP-Zustand ein Valence-Bond Zustand mit wechselwirkenden Tripletts auf den Diagonalen und quasifreien $S = 1/2$ Randspins an den Leiterenden. Der MP-Zustand entspricht damit den vier entarteten Grundzustandswellenfunktionen des AKLT-Modells.

Im allgemeinen wird die Wellenfunktion zwischen diesen beiden Grenzfällen interpolieren, und die Randspins bestimmen zu einem gewissen durch die Korrelationslänge bestimmten Maße die Orientierung in den angrenzenden Leiterbereichen. Der MP-Ansatz unterschätzt die Korrelationslänge, gibt die Tendenz jedoch korrekt wieder. Die Korrelationen fallen mit wachsendem b vom AKLT-Limes zum MG-Punkt hin ab.

Zur qualitativen Analyse werden die vier MP-Zustände in ein Singlett und ein Triplet aufgeteilt und die effektiven Austauschenergien zwischen diesen beiden anhand der Energiedifferenz ermittelt. Das Singlett ist gegeben durch

$$|0, 0\rangle = Tr \prod_{i=1}^N g_i.$$

Das Triplet wird analog zu den Anregungen in Kapitel 1.3.4 konstruiert.

$$|1, 0\rangle = Tr \left\{ \prod_{i=1}^N g_i 2s^z \right\} \quad \text{mit} \quad s^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Position der Matrix s^z ist verantwortlich für die Lokalisierung des Triplets an den Rändern. Das so erhaltene Resultat für eine Konfiguration mit zwei Randdefekten im Abstand von p Sprossen ist

$$\begin{aligned} J_{eff,MP}^{Rand}(p) &= \frac{\langle 0, 0 | H^{(0)} + H^{(1)} | 0, 0 \rangle}{\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle} \\ &- \frac{\langle 1, 0 | H^{(0)} + H^{(1)} | 1, 0 \rangle}{\langle 1, 0 | 1, 0 \rangle} \\ &= \pm J_0 e^{-p/\xi}, \quad \text{mit} \quad J_0 \approx 0.77, \quad \xi^{-1} \approx 1.23. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Man erhält das richtige Vorzeichen für J_{eff} und einen im Rahmen der Näherung guten Wert für $p = 0$. Das Maß des exponentiellen Abfalls ist durch die vom MP-Ansatz gelieferte zu geringe Korrelationslänge wiederum überschätzt.

Die niederenergetische Struktur des Spektrums ist die Verallgemeinerung des im Haldanefall auftretenden Kennedy-Triplets für den Fall der Spinleiter. Der verwendete MP-Ansatz ist zwar allgemeiner als die RVB-Beschreibung aber der Effekt der quasifreien $S = 1/2$ Randspins ist derselbe. Die Resultate entsprechen in diesem Sinne den Ergebnissen von Hida [78], der ferromagnetische Kopplung auf den Sprossen betrachtet hatte. Es zeigte sich, daß die Effekte der ferromagnetischen Kopplung auf den Diagonalen auch durch eine antiferromagnetische Kopplung auf den Holmen und Sprossen erzeugt werden konnte.

Unitäre Transformation

Ein alternativer Ansatz zur Beschreibung der offenen Leiter mit zwei Defekten an den Enden ist das Ausintegrieren der Spinfreiheitsgrade auf den vollständigen Sprossen.

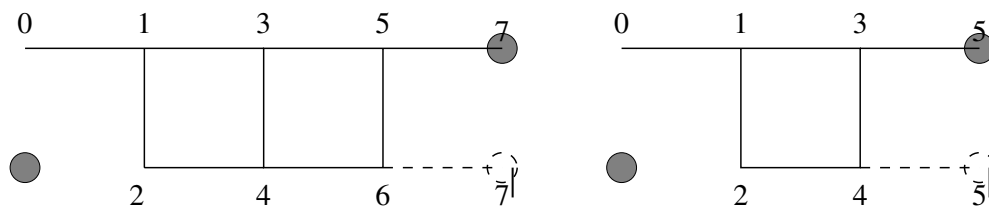


Abbildung 3.2 Kanonische Transformation für die beiden obigen Konfigurationen

Der Hamiltonoperator kann wie folgt geschrieben werden.

$$H = H_{ladder}(1, 2 \dots 2p) + h_{0,1} + h_{2p,2p+1} = H_0 + V \quad (3.17)$$

Zur Reduktion der Freiheitsgrade benutzen wir eine kanonische Transforma-

tion e^S

$$\begin{aligned}
\tilde{H} &= e^S H e^S \\
&= H + SH - HS + \frac{1}{2} (S^2 H H S^2 - 2SHS) + \dots \\
&= H[S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots \\
&= H_0 + V + [S, H_0] + [S, V] - \frac{1}{2} [S, V] + O(S^2). \tag{3.18}
\end{aligned}$$

S ist bestimmt durch die Eigenschaft

$$[S, H_0] = -V. \tag{3.19}$$

Die Basis wird aufgespannt durch das Tensorprodukt der Eigenzustände, die die geschlossenen Komplexe beschreiben ($H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$), und diejenigen, die die Randspins charakterisieren ($|\sigma_0\rangle, |\sigma_{2p+1}\rangle$). Damit ergibt sich mit $|a\rangle$ und $H|a\rangle = E_a|a\rangle$

$$\langle a|S|b\rangle (E_b - E_a) = -\langle a|V|b\rangle \tag{3.20}$$

und somit

$$\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[S, V] + \dots \tag{3.21}$$

Als weitere Näherung beschränken wir die Berechnung des Erwartungswertes der Energie von \tilde{H} auf solche Zustände $|a\rangle = |\sigma_0\sigma_{2p+1}\alpha\rangle$, bei denen $|\alpha\rangle = |0\rangle$ der Grundzustand der jeweiligen geschlossenen Komplexe mit $H_0|0\rangle = E_0|0\rangle$ ist.

$$\begin{aligned}
&\langle \sigma'_0\sigma'_{2p+1}0|\tilde{H}|\sigma_0\sigma_{2p+1}0\rangle \\
&= E_0\delta_{\sigma'_0\sigma_0}\delta_{\sigma'_{2p+1}\sigma_{2p+1}} \\
&+ \frac{1}{2}\langle \sigma'_0\sigma'_{2p+1}0|S(h_{0,1} + h_{2p,2p+1}) - (h_{0,1} + h_{2p,2p+1})S|\sigma_0\sigma_{2p+1}0\rangle \\
&= E_0\delta_{\sigma'_0\sigma_0}\delta_{\sigma'_{2p+1}\sigma_{2p+1}} + \langle \sigma'_0\sigma'_{2p+1}0|S(h_{0,1} + h_{2p,2p+1})|\sigma_0\sigma_{2p+1}0\rangle \\
&= E_0\delta_{\sigma'_0\sigma_0}\delta_{\sigma'_{2p+1}\sigma_{2p+1}} \\
&+ \sum_{\sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha} \langle \sigma'_0\sigma'_{2p+1}0|S|\sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha\rangle \langle \sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha|h_{0,1} + h_{2p,2p+1}|\sigma_0\sigma_{2p+1}0\rangle \\
&+ \sum_{\sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha} \frac{1}{E_0 - E_\alpha} \langle \sigma'_0\sigma'_{2p+1}0|h_{0,1} + h_{2p,2p+1}|\sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha\rangle \\
&\langle \sigma''_0\sigma''_{2p+1}\alpha|h_{0,1} + h_{2p,2p+1}|\sigma_0\sigma_{2p+1}0\rangle \\
&= J_{eff}\sigma_0\sigma_{2p+1} \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Damit ist es möglich, den Hamiltonoperator näherungsweise als effektives, niederenergetisches random–interaction Modell zu schreiben.

$$H_{\pm}^{(p)} = E_{0,\pm}(p) + J_{eff,\pm}(p) \vec{S}_0 \vec{S}_{2p+1} \quad (3.23)$$

Die Resultate für J_{eff} weichen von den numerischen Werten um bis zu 20% ab.

$$\begin{aligned} E_{0,\pm}(2) &= -\frac{5}{16} \\ J_{eff,+}^{edge}(2) &= \frac{1}{3} & J_{eff,-}^{edge}(2) &= -\frac{1}{4} \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} E_{0,\pm}(3) &= -0.344 \\ J_{eff,+}^{edge}(3) &= -0.2377 & J_{eff,-}^{edge}(3) &= 0.2248 \end{aligned} \quad (3.25)$$

Für zwei isolierte Spins würden die Beiträge höherer Ordnung die Werte noch korrigieren, aber die Form des Hamiltonoperators aufgrund der Isotropie, und da es sich um $S = 1/2$ Spins handelt, nicht verändern.

Dieser Ansatz zeigt, daß die Terme höherer Ordnung, die bei mehr als zwei $S = 1/2$ Spins zu weiterreichender Wechselwirkung als nur der zwischen den nächsten Nachbarn führen, nicht einfach vernachlässigt werden dürfen. Ein Modell mit ausschließlicher Wechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn in den defektinduzierten ungepaarten Spins, wie das random–interaction Modell, benötigt noch weitere rechtfertigende Argumente. Dazu dient der Vergleich im Kapitel 3.6.

3.4 Defekte im Inneren der Spinleiter

3.4.1 Numerische Ergebnisse

Im Gegensatz zu der exakten Diagonalisierung erlaubten die DMRG–Rechnungen die Behandlung erheblich größerer Systeme, sodaß die Wechselwirkung zweier Verunreinigungen im Inneren der Leiter betrachtet werden konnte. Ein Abstand der Defekte zum Rand von 20 Sprossen war dabei ausreichend. Die Aufspaltung der niedrigen Zustände ist wiederum durch einen effektiven Hamiltonoperator zu beschreiben, wobei $J_{eff,\pm}^{Rand}(p)$ durch $J_{eff,\pm}^{Innen}(p)$ ersetzt wird. Letztere Größe ist in Tabelle 3.2 und in Abbildung 3.3 gezeigt.

Es ergibt sich wiederum für $p \geq 5$

$$J_{eff,\pm}^{Innen}(p) = J_{0,\pm}^{Innen} e^{-p/\xi}, \quad \text{mit} \quad J_{0,+}^{Innen} \approx 0.43, \quad \xi \approx 3.1. \quad (3.26)$$

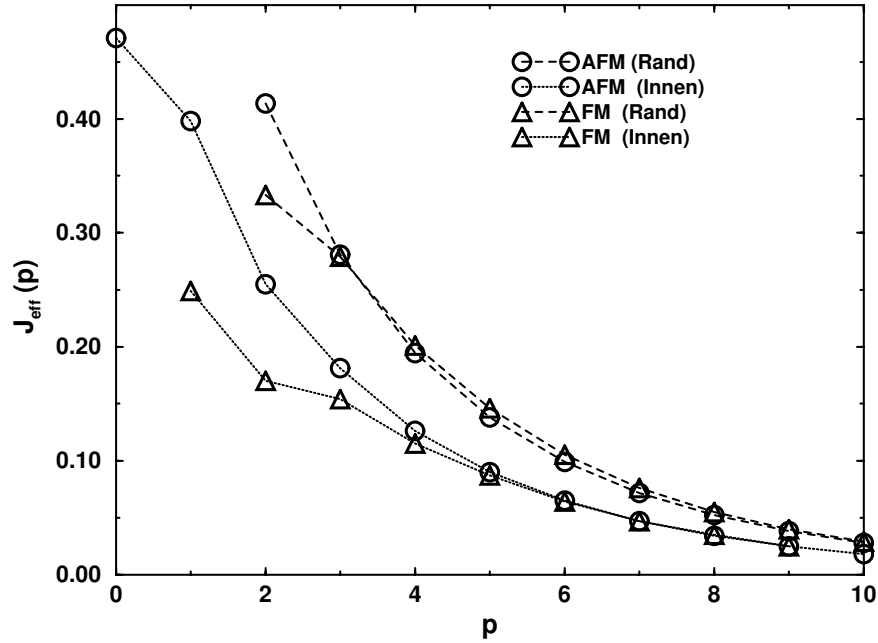


Abbildung 3.3: $J_{eff,\pm}^{Innen}(p)$ und $J_{eff,\pm}^{Rand}(p)$ in Abhängigkeit vom Abstand (p).

$J_{0,-}^{Innen}$ ist annähernd gleich $J_{0,+}^{Innen}$, aber weniger genau bestimmbar. Es zeigt sich, daß die Werte im Inneren ($J_{eff}^{Innen}(p)$) im Gegensatz zu den Randwerten ($J_{eff}^{Rand}(p)$) durch einen Faktor $r_{exc,\pm}$ reduziert sind.

$$J_{eff,\pm}^{Innen}(p) = r_{exc,\pm}(p) J_{eff,\pm}^{Rand}(p) \quad (3.27)$$

Bei effektiver, antiferromagnetischer Wechselwirkung ist der Reduktionsfaktor $r_{exc} \approx 0.65$ unabhängig von p , bei effektiver, ferromagnetischer Wechselwirkung erreicht er diesen Wert asymptotisch.

Die qualitative Erklärung des Reduktionsfaktors ist die unterschiedliche Delokalisierung der Magnetisierung der ungepaarten Spins. Im Inneren wird die Magnetisierung nach rechts und links verschmiert, am Rand hingegen nur zu einer Seite.

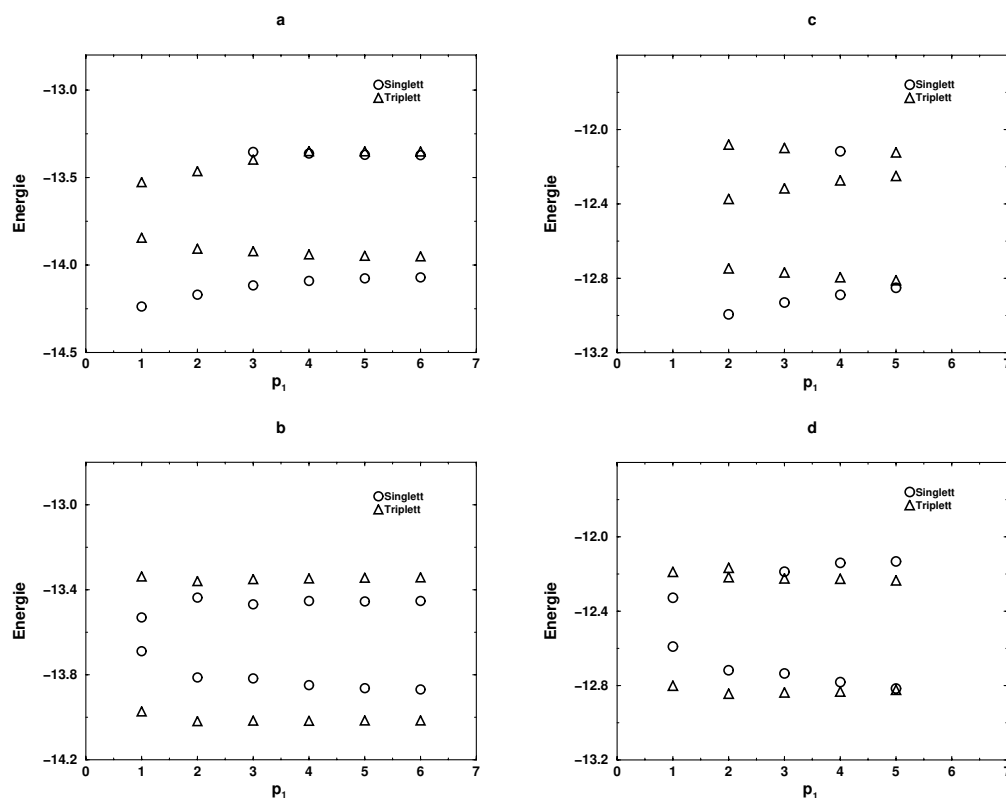


Abbildung 3.4 Spektren für $p_1 + p_2 = 12$ (a,b) und für $p_1 + p_2 = 11$ (c,d)

Die Abhängigkeit der effektiven Wechselwirkung ist auch bei dieser Extrapolation rein exponentiell. Ein Verhalten, wie in [74] vorgeschlagen, mit einem zusätzlichen Faktor $1/\sqrt{p}$ ist wiederum nicht zu erkennen, zumal sich selbst bei dem besten Fit eine erheblich vergrößerte Korrelationslänge ($\xi \approx 4$) ergäbe. Es sind im weiteren exakte Diagonalisierungen an Systemen mit periodischen Randbedingungen durchgeführt worden. Dabei befinden sich zwei Verunreinigungen im Abstand p_1 bzw. p_2 in einem System der Größe $p = p_1 + p_2$. Die Spektren sind in den Abbildungen 3.4.a und 3.4.b für $p_1 + p_2 = 12$ und in den Abbildungen 3.4.c und 3.4.d für $p_1 + p_2 = 11$ dargestellt.

Qualitativ ergibt sich eine Situation wie im Fall offener Randbedingungen. Es zeigt sich, daß der kleinere der beiden Abstände bestimmt, welche Wechselwirkung dominiert und somit welche Magnetisierung der Grundzustand hat. Desweiteren zeigen die Bilder in Abbildung 3.4 eine erheblich größere Aufspaltung für $p = p_1 + p_2$ gerade, als für $p = p_1 + p_2$ ungerade. Bei geradem p besitzen die

Wechselwirkungen über die p_1 Sprossen und die p_2 Sprossen gleiche Vorzeichen, und die Anregungsenergien addieren sich, wohingegen sie bei ungeradem p unterschiedliche Vorzeichen haben und die Energielücke aus der Differenz der beiden Wechselwirkungen resultiert. Als Konsequenz des Konzeptes einer effektiven Wechselwirkung sollte die Beziehung

$$J_{eff}^{pbc}(p_1, p_2) = J_{eff}^{bulk}(p_1) + J_{eff}^{bulk}(p_2) \quad (3.28)$$

gelten, die mit 90% iger Genauigkeit erfüllt ist.

In Abbildung 3.4 sind die Resultate für die niedrig liegenden Anregungen dargestellt. Für die Mehrheit der Defektkonfigurationen besitzen die Aufspaltungen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes verschiedene Vorzeichen. Diese Regel ist jedoch nicht in jedem Fall beachtet, so daß es einer weitergehenden Analyse dieses Verhaltens bedarf.

3.5 Lokale defektinduzierte Magnetisierung

Die Analyse der Spinkonfigurationen in der Umgebung eines Defektes ist als Maß zur Bestimmung der effektiven Wechselwirkung wichtig. Betrachtet werden zwei defektinduzierte ungepaarte Spins in einem Abstand n größer als die Korrelationslänge voneinander entfernt. Dann wird die Projektion der ungepaarten Spins in die angrenzenden Leiterbereiche hinein streuen.

Um diesen Effekt quantitativ zu untersuchen, wird die lokale Magnetisierung $S_{\pm}^z(m)$ betrachtet, wobei $m = 0$ den Platz des ungepaarten Spins kennzeichnet und das positive Vorzeichen das Untergitter des ungepaarten Spins benennt sowie das negative das des Defektes. Wenn die beiden ungepaarten Spins genügend weit von einander entfernt sind, erhält man ein deutliches Bild der Umgebung eines einzelnen Defektes. Die totale Magnetisierung ist hierbei auf $S_{tot}^z = 1$ festgesetzt. Dann entfällt auf die beiden ungepaarten Randspins jeweils $S^z = +1/2$ als z -Projektion.

Die Ergebnisse aus DMRG-Rechnungen und exakter Diagonalisierung sind in Abbildung 3.5 dargestellt. Dabei sind alle Daten von der Form

$$\begin{aligned} \langle S_{m,\alpha}^z \rangle &= s_{center}^z && \text{für } m = 0 \\ &= s_{tail}^z e^{-\frac{|m|}{\xi}} && \text{für } |m| > 0, \alpha = + \\ &= -s_{tail}^z e^{-\frac{|m|}{\xi}} + \delta_m && \text{für } |m| > 0, \alpha = - \end{aligned}$$

Bei ausreichendem Abstand der Defekte ist die totale Magnetisierung für einen Defekt im Inneren durch

$$s_{center}^z + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \delta_p = \frac{1}{2}$$

und für einen Randdefekt durch

$$s_{center}^z + \sum_{m=1}^{\infty} \delta_p = \frac{1}{2} \quad (3.29)$$

gegeben.

Die Korrektur δ_p verschwindet rasch für $p \geq 5$. Quantitative Resultate aus den exakten Diagonalisierungen sind (bei Randspins korrigiert aufgrund des zweiten Defektes am anderen Rand)

$$\xi = 3.1 \quad s_{center}^z = 0.348 \quad s_{tail}^z = 0.308 . \quad (3.30)$$

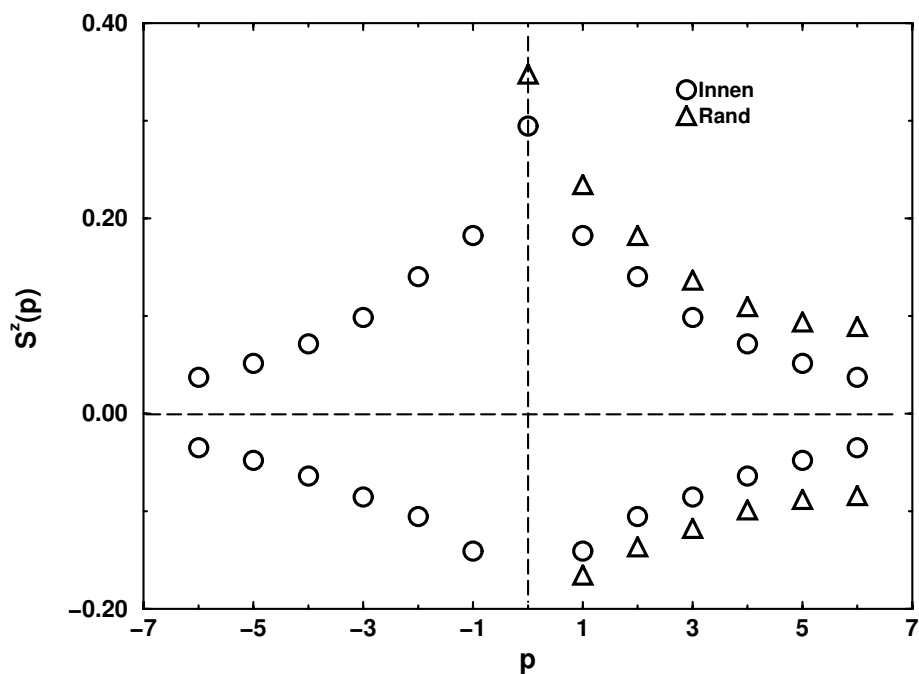


Abbildung 3.5 Lokale Magnetisierung in der Umgebung eines Defektes, p ist der Abstand (in Sprossen) zum ungepaarten Spin.

Die DMRG–Resultate zeigen die innere Struktur.

$$\xi = 3.1 \quad s_{center}^z = 0.294 \quad s_{tail}^z = 0.247, \quad (3.31)$$

S_{Rand}^z ist die Amplitude, die das Maß der Verteilung der Spinprojektion in die angrenzenden Leiterbereiche angibt und hier von der gleichen Größenordnung ist, wie die lokale Magnetisierung am Ort des ungepaarten Spins. Die totale Überschußmagnetisierung auf dem Untergitter des ungepaarten Spins ist 0.894 (Innen) bzw. 1.117 (Rand) und auf dem Untergitter des Defektes -0.792 (Innen) bzw. 0.965 (Rand). Es zeigt sich, daß das asymptotische exponentielle Verhalten charakterisiert durch die Korrelationslänge für größere Abstände ($p > 5$) richtig ist.

Der Unterschied zwischen J_{eff}^{Rand} und J_{eff}^{Innen} ist anhand der numerischen Daten in einem mikroskopischen Zusammenhang zu verstehen. Für einen ungepaarten Spin im Inneren sind die Werte von S_{center}^z und S_{tail}^z durch einen Faktor 0.8 im Vergleich zu den Randwerten reduziert. Da die effektive Wechselwirkung zweier Spins durch den Überlapp der Ausläufer der Verteilung (S_{tail}^z) bestimmt wird, ist J_{eff} für ungepaarte Spins im Inneren kleiner als für solche am Rand. Der Wert des Reduktionsfaktors

$$\left(\frac{s_{tail}^{z,Innen}}{s_{tail}^{z,Rand}} \right)^2 \approx 0.64, \quad (3.32)$$

ist konsistent mit dem in Kapitel 3.4 gefundenen.

Die lokale Magnetisierung in Umgebung eines Defektes ist auch aus MP–Rechnungen zu bestimmen (Anhang F).

$$s_{center}^z = a^2 + ab \approx 0.422. \quad (3.33)$$

Das Verhalten auf den angrenzenden Sprossen unterscheidet sich von den numerischen Werten im Detail. $S^z(p)$ zeigt ein rein exponentielles Verhalten mit alternierendem Vorzeichen und verschiedenen Amplituden auf den Holmen. Auf dem Holm des Defektes ergibt sich

$$\tilde{s}_{tail}^z = -a/(a + b) \approx -0.767 \quad (3.34)$$

und auf dem gegenüberliegenden

$$\tilde{s}_{tail}^z = a^2 + ab \approx 0.422. \quad (3.35)$$

Wiederum führt der MP–Ansatz zu qualitativ richtigen Resultaten, bleibt jedoch unzureichend bei der quantitativen Analyse.

3.6 Numerischer Test der effektiven Beschreibung

In Tabelle 3.3 sind für einige typische Konfigurationen die nach dem Gesamtspin klassifizierten Resultate aus DMRG-Rechnungen im Vergleich zu Ergebnissen des effektiven Paar-Modells dargestellt, um

- das effektive Paar-Modell quantitativ zu beurteilen.
- das Auffüllen der Energielücke der Leiter mit Defektzuständen zu beobachten.
- den Effekt verschiedener Vorzeichenkombinationen der Defektverteilung zu verdeutlichen.

Es zeigt sich eine befriedigende Übereinstimmung. Die Abweichungen liegen unter zehn Prozent

In Abbildung 3.6 sind aufgrund der hervorragenden Übereinstimmung die DMRG-Daten angegeben, soweit sie verfügbar sind. Hohe angeregte Singletts und Tripletts sind bei den DMRG-Rechnungen nur schwer zu erhalten, daher sind in diesen Fällen die Werte des effektiven Paar-Modells aufgetragen.

In Abbildung 3.6.a - e sind die Spektren für vier Defekte getrennt durch vier, drei und fünf vollständige Sprossen gezeigt. Die Abkürzungen A,F weisen auf die relative Position der Defekte zueinander hin. Wenn zwei benachbarte Defekte auf dem gleichen Untergitter sind, ist die Wechselwirkung zwischen Ihnen ferromagnetisch (F) und die effektive Kopplung (J_{eff}) ist negativ. Anderenfalls ist die Wechselwirkung antiferromagnetisch (A) und die effektive Kopplung positiv. Die möglichen Vorzeichenkombinationen führen auf verschiedene Resultate. Die generelle Tendenz zum Auffüllen der Energielücke der Leiter ist jedoch deutlich erkennbar.

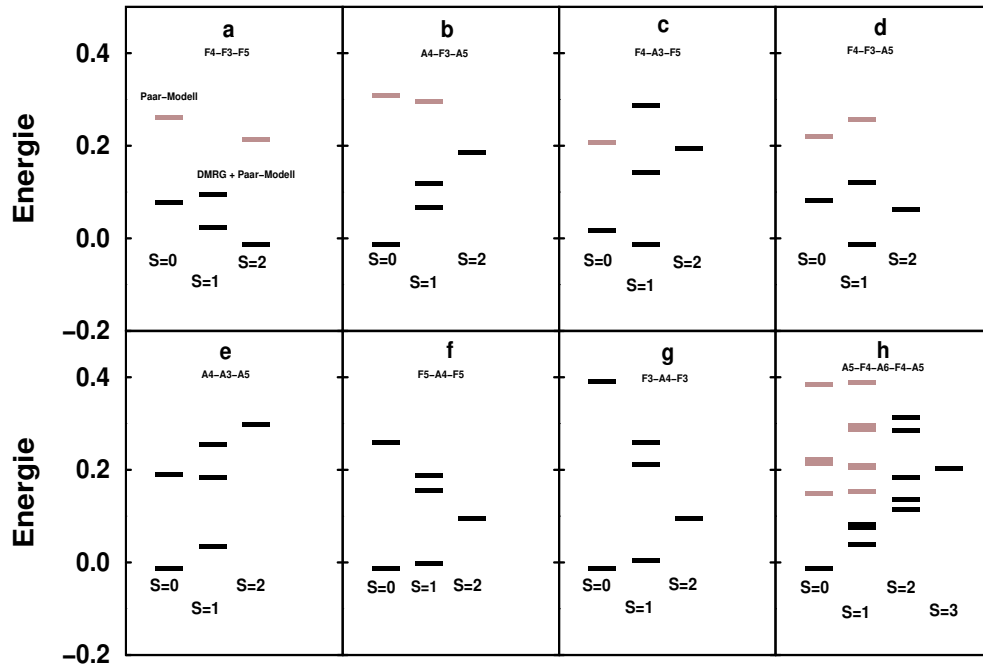


Abbildung 3.6 Vergleich der niedrig liegenden Spektren der dotierten Spinleiter und des effektiven Modells.

Die Abbildungen 3.6.a und 3.6.e gehen trotz geringer Unterschiede in den Wechselwirkungstärken durch einen globalen Vorzeichenwechsel ineinander über. Deshalb sind nur drei weitere (2.6.b - d) der übrigen sechs Kombinationen gezeigt. In Abbildung 3.6.f und 3.6.g sind zwei Beispiele symmetrischer Kombinationen aus vier Defekten gezeigt. Die zusätzliche Symmetrie ist die Parität mit der Quantenzahl p , sie charakterisiert hier die Levelstruktur. Die Abbildung 3.6.h zeigt das Spektrum für sechs Defekte in einer symmetrischen Kombination.

Beide Rechnungen zeigen, wie die Zustandsdichte der Tripletzustände bei niedrigen Energien mit der Anzahl der Defekte wächst. Jedoch ist eine wesentlich größere Anzahl von Defekten nötig, um verlässliche numerische Aussagen über die Zustandsdichte bei niedrigen Energien zu machen.

A(4) F(3) A(5)			A(4) A(3) A(5)		
S^{tot}	Leiter	eff. Modell	S^{tot}	Leiter	eff. Modell
0	0.000	0.000	0	0.000	0.000
1	0.079	0.07776	1	0.047	0.04730
1	0.131	0.12681	1	0.197	0.19146
2	0.198	0.19196	0	0.204	0.20080
1		0.30932	1	0.269	0.26093
0		0.32193	2	0.310	0.29890
F(4) A(3) A(5)			F(4) F(3) A(5)		
1	0.000	0.000	1	0.000	0.000
0	0.030	0.02582	2	0.075	0.07296
1	0.156	0.15188	0	0.094	0.09089
2	0.208	0.20117	1	0.134	0.12860
0		0.22053	0		0.23404
1	0.302	0.29564	1		0.26930
F(4) F(3) F(5)			F(5) A(4) F(5)		
2	0.000	0.000	0	0.000	0.000
1	0.036	0.03474	1	0.010	0.010
0	0.094	0.08660	2	0.109	0.107
1	0.108	0.10041	1	0.168	0.164
2		0.22085	1	0.201	0.194
0		0.26940	0	0.273	0.261
F(3) A(4) F(3)			A(5) F(4) A(6) F(4) A(5)		
0	0.000	0.000	0	0.000	0.000
1	0.017	0.017	1	0.051	0.049
2	0.109	0.104	1	0.088	0.081
1	0.225	0.216	1	0.095	0.091
1	0.271	0.257	2	0.128	0.126
0	0.403	0.387	2	0.148	0.133
			0		0.161
			1		0.166
			2	0.196	0.182
			3	0.216	0.202
			1		0.219
			1		0.223
			0		0.226
			0		0.235
			2	0.298	0.281
			1		0.309
			2	0.325	0.311
			0		0.398
			1		0.401

Tabelle 3.3: Vergleich der niedrig liegenden Spektren der dotierten Spinleiter und des effektiven Modells.

3.7 Korrelationsfunktionen und Neutronenstreuquerschnitt

In diesem Abschnitt wollen wir anhand der gewonnenen Ergebnisse für defektinduzierte Anregungen in Spinleitern die Resultate aus Neutronenstreuexperimenten an der Substanz $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [26] interpretieren.

Es hat sich gezeigt, daß die Dotierung der regulären Spinleiter mit antiferromagnetischer Kopplung zum Auftreten niedrig liegender defektinduzierter Anregungen unterhalb der Energielücke der undotierten Spinleiter führte [75, 74, 72].

Experimentell ist ein solches Phänomen bei Suszeptibilitätsmessungen an der mit Zn dotierten Leitersubstanz SrCu_2O_3 beobachtet worden [79].

Im Gegensatz zum nur in Pulverform erhältlichen SrCu_2O_3 ist $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ als Einkristall verfügbar und ermöglicht somit detailliertere Studien im Bezug auf Verunreinigungseffekte und die Dynamik.

$\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ besteht aus größtenteils unabhängigen CuO_2 zickzack-Ketten und Cu_2O_3 Leitern. Die Einheitszelle besteht aus 10 CuO_2 Einheiten, 7 Cu_2O_3 Einheiten und 14 Sr-Ionen. Durch Zählung der Valenzen findet man als mittlere Zahl von Valenzen für das Cu-Ion 2.25. Damit sind im Mittel 18 der 24 Cu-Ionen in der Einheitszelle Cu^{2+} -Ionen und 6 Cu^{3+} -Ionen. Die Cu^{3+} -Ionen sind unmagnetisch und stellen intrinsische Defekte dar. Sie befinden sich größtenteils in den Ketten und bilden Zhang-Rice-Singletts. Die restlichen verteilen sich in den Leitern und führen dort zu einer Defektdichte von ungefähr 5%. Die intrinsische Defektkonzentration kann durch Ersetzen von Sr_{14} durch $\text{Sr}_{14-x}\text{Y}_x$ verringert werden und verschwindet bei Sr_3Y_6 . Eine Abwanderung der Cu^{3+} -Ionen von den Ketten in die Leiter wird durch Ersetzen von Sr_{14} durch $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x$ erreicht. Die Dotierung mit Kalzium hat aber noch einen viel drastischeren Effekt. In $\text{Sr}_{2.5}\text{Ca}_{11.5}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ konnte bei sehr hohen Drücken (3.5GPa) Supraleitung beobachtet werden [80].

Bei den Resultaten der Neutronenstreuexperimente an $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ können aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten Beiträge des Kettensystems und des Leitersystems unterschieden werden. Aufgrund der zu geringen Neutronenenergie ist es nicht möglich die Energielücke der Leiter $0.5J \approx 35\text{meV}$ zu messen. Es ist jedoch eine magnetische Anregung des Leitersystems bei $11\text{meV} \approx 0.16J$ gefunden worden. Diese Anregung ist verbunden mit der Gegenwart der Defekte, da sie bei Verringerung der Cu^{3+} Konzentration schwächer wird und schließlich verschwindet. Desweiteren wird diese Anregung bei einem reduzierten Wellenvektor $Q_{ladder} = (0, 0, 1)$ gefunden. Dies ist signifikant für das Vorhan-

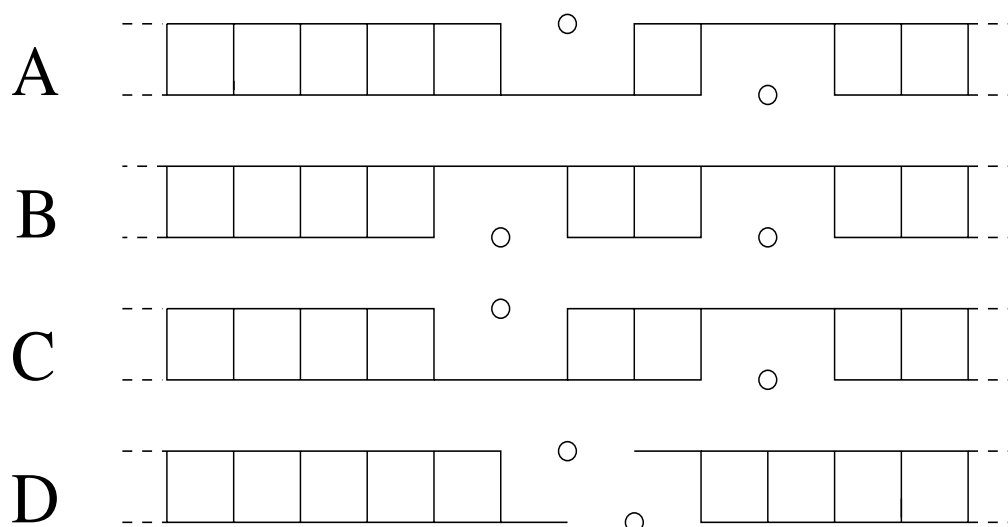


Abbildung 3.7: Konfigurationen mit zwei Defekten.

densein ferromagnetischer Korrelationen, im Gegensatz zu den charakteristischen antiferromagnetischen Korrelationen der undotierten regulären Spinleiter.

Im folgenden werden Ergebnisse für die Energien und Strukturfaktoren der ungestörten Leiter vorgestellt und mit denen vier verschiedener Konfigurationen mit zwei Defekten (Abbildung 3.7) verglichen.

Diese Konfigurationen sind die einzigen mit zwei Defekten, die eine den Messungen entsprechende Energielücke besitzen. In Konfiguration D brechen die Defekte die magnetische Struktur der Leiter, wenn nur Wechselwirkungen zwischen benachbarten Spins berücksichtigt werden. Bei Hinzunahme einer zusätzlichen Wechselwirkung zwischen den übernächsten Nachbarn, die vermutlich negatives Vorzeichen besitzt, ergibt sich jedoch lokal eine ferromagnetische Konfiguration. In Tabelle 3.4 sind die defektinduzierten Singlett–Triplet–Anregungslücken (zu Konfiguration A - C [75], bei Konfiguration D ist $J_{NNN}(\text{Endspins}) = -0.4J$) und ebenso die Ergebnisse für den defektinduzierten Strukturfaktor unter der einfachen Annahme angegeben, daß die ungepaarten Spins ein Dimer bilden [81].

3.7. KORRELATIONSFKTN. UND NEUTRONENSTREUQUERSCHNITT 87

A	$\Delta = 0.170J$	$S(Q_x, Q_z) = 1 + \cos^2(3Q_z + rQ_x)\pi$
B	$\Delta = 0.154J$	$S(Q_x, Q_z) = 1 + \cos^2(4\pi Q_z)$
C	$\Delta = 0.181J$	$S(Q_x, Q_z) = 3 \sin^2(4Q_z + rQ_x)\pi$
D	$\Delta = 0.172J$	$S(Q_x, Q_z) = 1 + \cos^2(Q_z + rQ_x)\pi$

Tabelle 3.4: Energien und Dimer Strukturfaktor für Konfigurationen mit zwei Defekten.

Den reduzierten Wellenvektor \vec{Q} definiert man mittels des übertragenen Impulses \vec{q} gemäß

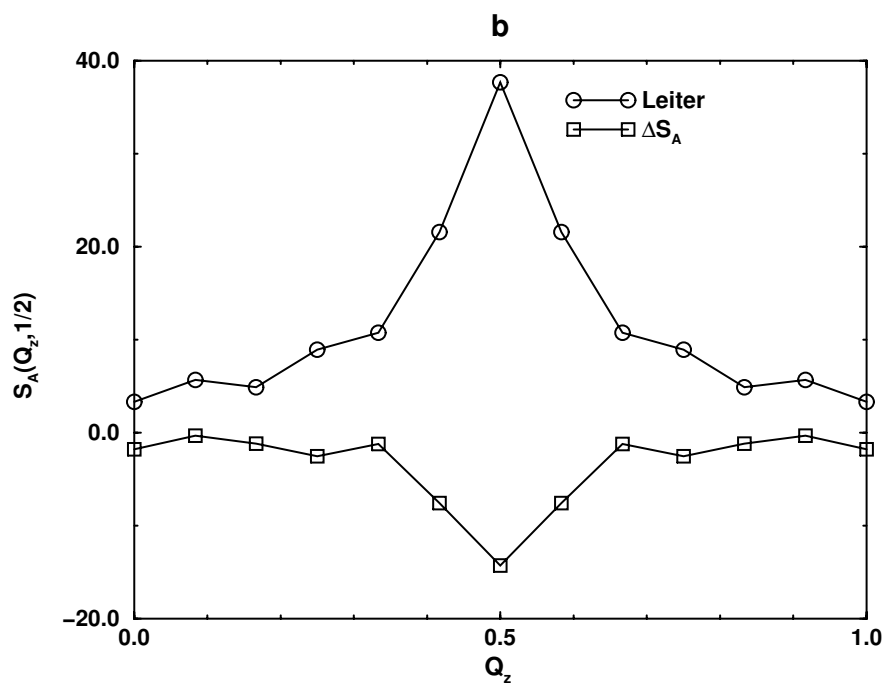
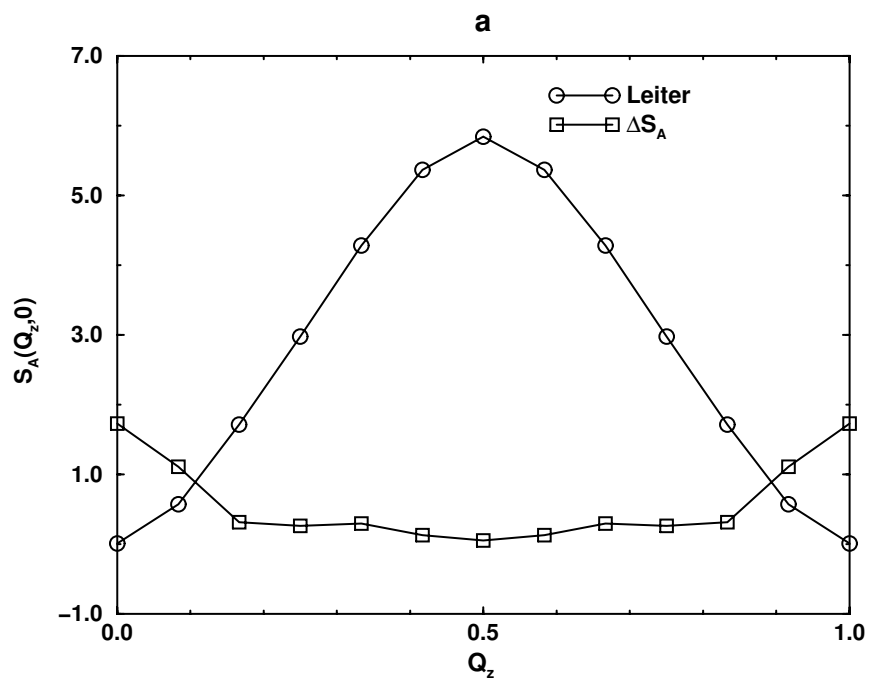
$$q_z = \frac{2\pi}{c}Q_z, \quad q_x = \frac{2\pi}{a}Q_x. \quad (3.36)$$

Die Gitterkonstanten von $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ sind dann festgelegt durch $2c$ und a . Die Gitterkonstanten der zugrunde liegenden Leiterstruktur sind c (Abstand zweier Sprossen) und $ra, r \approx 0.3$ (Abstand der Holme).

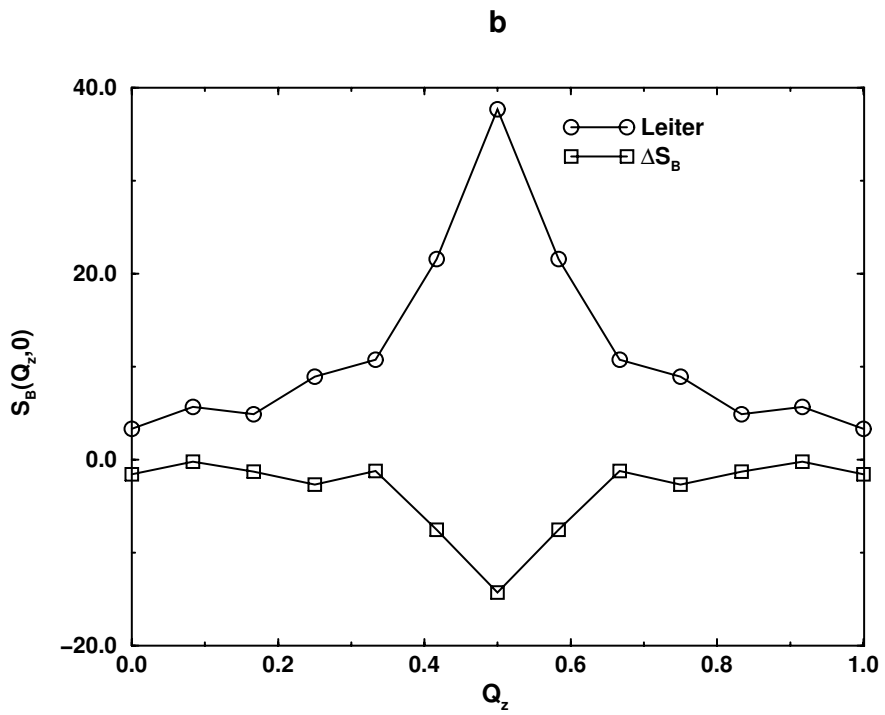
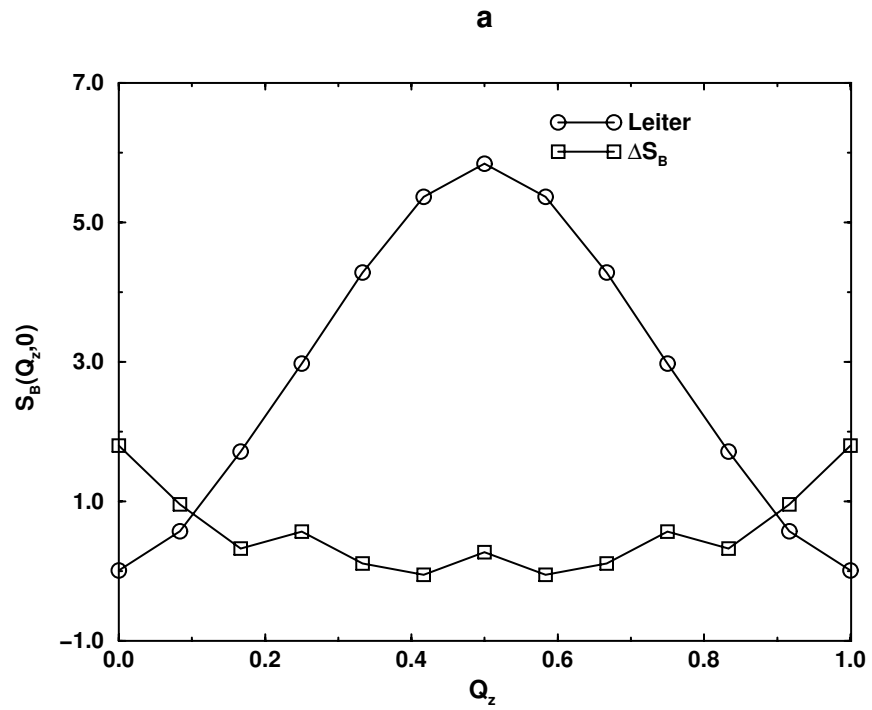
Aus Tabelle 3.4 entnimmt man, daß die Konfigurationen A - C in der Dimernäherung nicht in der Lage sind, die ferromagnetischen Korrelationen zu reproduzieren, da zusätzliche Maxima in der Brillouinzone existieren.

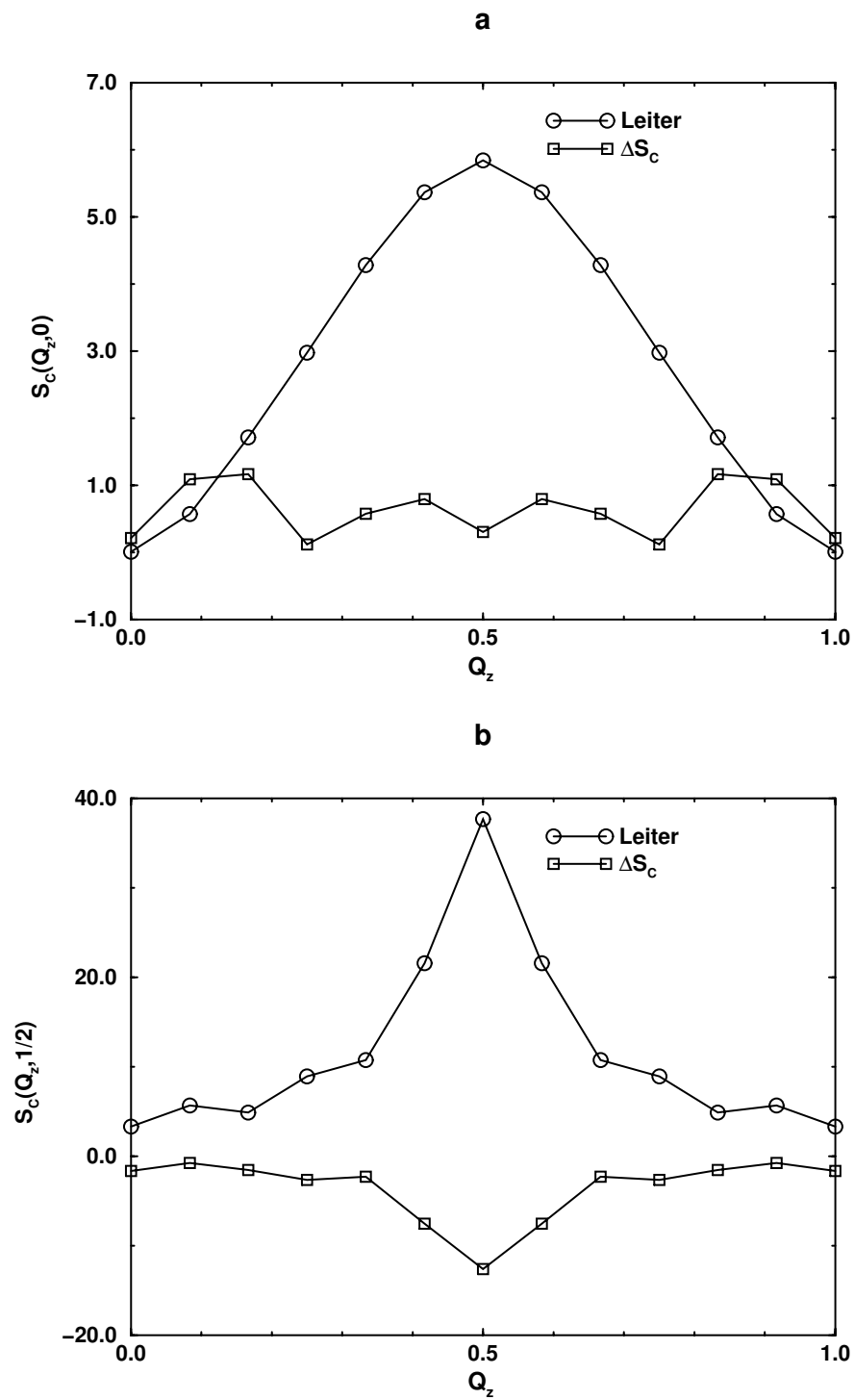
Für eine detailliertere Beschreibung sind numerische Berechnungen des statischen Strukturfaktors mittels exakter Diagonalisierung endlicher Systeme ($N=24$) durchgeführt worden. Die Resultate für die verschiedenen Konfigurationen sind in Abbildung 3.8 dargestellt. Da keine Wechselwirkung zwischen den Leitern berücksichtigt wurde, ist der Strukturfaktor für ein beliebiges \vec{Q} gegeben durch

$$S(rQ_x, Q_z) = \cos^2(\pi rQ_x)S(Q_x = 0, Q_z) + \sin^2(\pi rQ_x)S(Q_x = 1/2, Q_z). \quad (3.37)$$



3.7. KORRELATIONSFKTN. UND NEUTRONENSTREUQUERSCHNITT 89





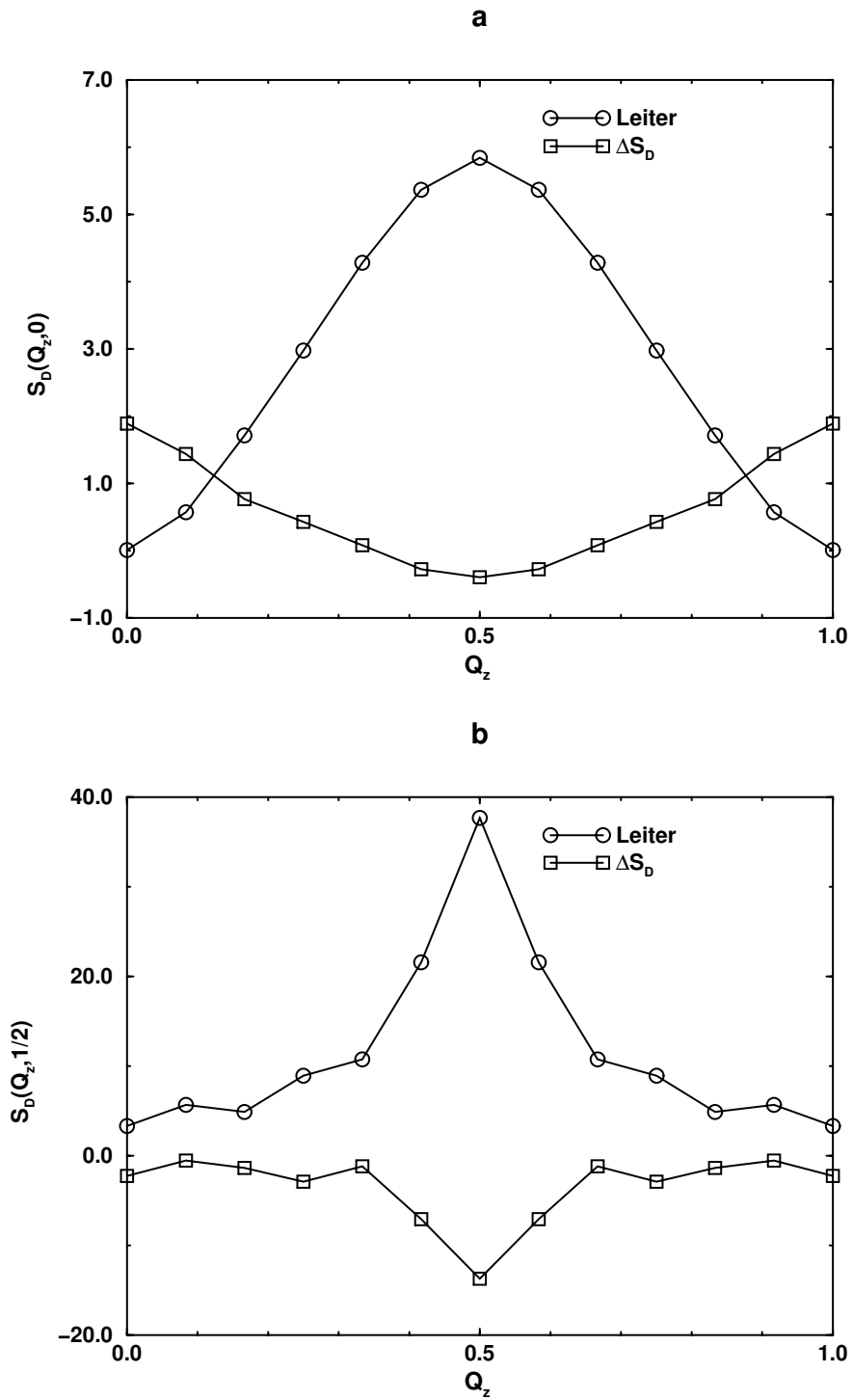


Abb. 3.8 Vergleich des statischen Strukturfaktors der ungestörten Spinleiter und der Defektkonfigurationen A-D.

Abbildung 3.8 zeigt sowohl den Strukturfaktor der ungestörten Leiter als auch die Änderung $\Delta S_{A,B,C,D}$ nach dem Einfügen zweier Defekte. $\Delta S_{A,B,C,D}$ wurde durch Differenzbildung des Strukturfaktors der Defektkonfiguration und dem der ungestörten Leiter gewonnen. Bei der Berechnung des Strukturfaktors der Defektkonfiguration sind die Korrelationen berücksichtigt worden, die Abweichungen vom Wert der ungestörten Leiter zeigten. Die Beschränkung in der Anzahl der Spins machte es außerdem erforderlich, Korrelationen nur bis zu einer gewissen maximalen Entfernung von den Defekten zu berücksichtigen. Um diesen Effekt zu untersuchen, sind die Strukturfaktoren einerseits wie beschrieben berechnet worden und andererseits ohne die längsten berücksichtigten Korrelationen. Der Unterschied der Ergebnisse war vernachlässigbar.

Der Strukturfaktor der ungestörten Leiter ist proportional zur Anzahl der Plätze. Die Resultate sind hier für zehn Plätze dargestellt. Die Differenz $\Delta S_{A,B,C,D}$ ist unabhängig von der Anzahl der Plätze. Die Extrapolation der Werte für die endlichen Systeme zeigte, daß der lokale Bereich der Defekte (maximal vier Holme entfernt vom Defekt) verantwortlich für die Deformation des Strukturfaktors der ungestörten Leiter ist. Es zeigt sich, daß die Dotierung zu einer signifikanten Zunahme der Streuung an den ferromagnetischen Punkten (rQ_x, Q_z) = k, l führt, wobei k, l ganze Zahlen sind. Erklärbar ist ein solches Verhalten nicht allein durch die Annahme einer Dimer-Konfiguration, viel mehr muß die Umgebung der Defekte genauer betrachtet werden.

Durch das Hinzufügen eines Defektes verschwinden größtenteils die extrem kurzreichweitigen, antiferromagnetischen Korrelationen zwischen dem Defekt und den benachbarten Spins. Die ferromagnetischen Korrelationen zwischen übernächsten Nachbarn hingegen bleiben erhalten und verursachen ein Anwachsen der Streuung an den ferromagnetischen Punkten. Die Intensität der defektinduzierten Streuung ist proportional zur Anzahl der Verunreinigungen. Sie kann direkt aus Abbildung 3.8 entnommen und dort mit dem antiferromagnetischen Hauptanteil der Streuung an der Leiter verglichen werden. Dies erlaubt einen direkten Vergleich mit den gemessenen Daten. In der bisher realisierten experimentellen Anordnung wird der dynamische Strukturfaktor gemessen. Dazu werden die Beiträge der niedrig liegenden Anregungen aufsummiert.

Für die isolierte Leiter ist der Strukturfaktor, abhängig von rQ_x , bestimmt worden, entsprechend dem Abstand der Holme $ra \approx a/3$, wobei die Gitterkonstante von $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ a ist. Auch wenn Dimere in identischer Weise auf verschiedenen Leitern lägen, wäre kein Braggpunkt in Q_x zu sehen, da die Korrelationen kurzreichweitig sind. Dies entspricht der Situation im Majumdar-Ghosh-Fall. Dort bildet der Grundzustand einen idealen Kristall aus Singletts, besitzt

3.7. KORRELATIONSFKTN. UND NEUTRONENSTREUQUERSCHNITT 93

jedoch keinerlei magnetische Braggpunkte, da Korrelationen nach einem Gitterabstand verschwinden. Aufgrund der sehr schwachen Wechselwirkung zwischen den Leitern [81], sollte zur Analyse der Experimente die Variable rQ_x verwendet werden.

Die experimentell beobachteten Energien und ferromagnetischen Korrelationen in der dotierten Spinleiter können somit qualitativ anhand der Ergebnisse der Spinleiter mit zwei Defekten verstanden werden.

Kapitel 4

Zusammenfassung

Es ist das Phasendiagramm der verallgemeinerten Spinleiter mittels exakter Diagonalisierungen und Matrix-Produkt-Rechnungen untersucht worden. Die verallgemeinerte Spinleiter beinhaltet verschiedene Spezialfälle, wie den $S = 1$ HAFM, den $S = 1/2$ HAFM, das MG-Modell und das vollständig dimerisierte Modell. Von dem Konzept der verborgenen Ordnung ausgehend, wurde eine MP-Ansatzwellenfunktion gesucht, die rotationsinvariant war und als Variationswellenfunktion für den Grundzustand die bekannten Resultate des Majumdar-Ghosh-Modells sowie des AKLT-Modells lieferte. Die Konstruktion solitonartiger Anregungen im MP-Formalismus erfolgte analog zu der im Haldanefall.

Es wurden die Werte der Grundzustandsenergie, der Anregungslücke sowie der Spin- und Stringkorrelationen verglichen. Es zeigte sich eine Abweichung zu den numerischen Werten von maximal 4%-5%. Die Grenzfälle wurden korrekt wiedergegeben. Im Fall $\gamma \rightarrow -\infty$ reproduziert man den AKLT-Grundzustand und im Dimer- und MG-Fall die entsprechenden exakten Grundzustände. Die Extrapolation der numerischen Daten für die Grundzustandsenergie und die Anregungslücke wurde für den Limes $\gamma \rightarrow -\infty$ mit einem Fit an ein Polynom vierten Grades durchgeführt und eine sehr gute Übereinstimmung mit den bekannten Resultaten gefunden.

Es zeigte sich, daß die im MP-Formalismus konstruierten Anregungen im Bereich $k = \pi$ gute Ergebnisse lieferten. Da diese Anregung jedoch immer eine Dispersion mit minimalem Wellenvektor bei $k = \pi$ besaß, waren die Ergebnisse im Bereich oberhalb der Shastry-Sutherland-Linie bis hin zum $S = 1/2$ HAFM unzureichend. Eine Verallgemeinerung der solitonischen Anregung, die den Wechsel des Wellenvektors von $k = 0$ zu $k = \pi$ beschreibt, ist von Brehmer et al. [64] konstruiert worden.

Anhand der Numerischen Daten und der Ergebnisse aus MP-Rechnungen sind auf einem Weg, der kontinuierlich die Spezialfälle Dimer-Modell, MG-Modell und Haldankette verband, die Werte der Grundzustandsenergie, der Anregungslücke und der Grundzustandskorrelationen verfolgt worden. Die beobachteten Werte zeigen dabei ein unauffälliges Verhalten. Daher liegt der Schluß nahe, daß die Haldankette, das vollständig dimerisierte Modell und die reguläre Spinleiter in derselben Phase liegen und die Anregungslücke gleichen Ursprungs ist. Andererseits zeigt die Dispersionsrelation beim Überqueren der Shastry-Sutherland-Linie einen Wechsel des Wellenvektors der niedrigsten Mode von $k = 0$ zu $k = \pi$. Die genauere Untersuchung an endlichen Systemen ergab für Punkte in dem Übergangsbereich Dispersionrelationen mit endlichem Wellenvektor und bestätigte damit das Bild einer inkommensurablen Phase in der Umgebung der Shastry-Sutherland-Linie. Die geringe Anzahl der Sprossen und die Schwierigkeiten Impulswerte zwischen 0 und π zu extrapolieren, zusammen mit der schmalen Bandbreite, lassen einen eindeutigen Schluß jedoch trotz der geringen Korrelationslänge nicht zu. Somit bleibt die Frage nach der Existenz einer spiralen Phase in der Umgebung der Shastry-Sutherland-Linie unbeantwortet.

Es ist ein numerisches Verfahren vorgestellt worden, mit dessen Hilfe die thermodynamischen Größen für verschiedene Spezialfälle der verallgemeinerten Spinleiter bestimmt wurden. Es ergab sich eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den aus exakten Rechnungen für kleine Systemen ($N=8$) gewonnenen Resultaten für die spezifische Wärme und die magnetische Suszeptibilität und den Ergebnissen des Kernpolynomverfahrens. Ebenfalls gute Übereinstimmung ergab der Vergleich der magnetischen Suszeptibilität des vollständig dimerisierten Modells für $N=24$ Spins mit dem exakten analytischen Ausdruck. Der Vergleich der magnetischen Suszeptibilität der regulären Spinleiter ($N=16,24$) mit Ergebnissen aus Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen offenbarte im Tieftemperaturverhalten unterhalb von 0.5K geringe Abweichungen, die jedoch mit einer höheren Anzahl von Zufallsvektoren bei der Berechnung der Momente verschwinden sollten.

Bei dem Vergleich der magnetischen Suszeptibilität des $S = 1/2$ Heisenbergmodells ($N=24$) mit exakten Daten aus Bethe-Ansatz Rechnungen wurde erwartungsgemäß unterhalb einer kritischen Temperatur die Endlichkeit des Systems sichtbar. Die bei endlichen Systemen immer existente Anregungslücke oberhalb des Grundzustandes bewirkt in der magnetischen Suszeptibilität immer ein exponentielles Tieftemperaturverhalten. Ein nahezu horizontaler Verlauf, wie im Fall des $S = 1/2$ Heisenbergmodells, ist daher nicht zu beschreiben. Systeme mit im thermodynamischen Limes endlicher Anregungslücke und geringer Korrelationslänge werden daher deutlich besser beschrieben, als solche mit einem masselosen

Spektrum.

Die Abweichungen in der spezifischen Wärme sind nicht derart drastisch von dem finite-size Verhalten betroffen. Die Ergebnisse für das $S = 1/2$ Heisenbergmodell zeigen sogar das korrekte lineare Tieftemperaturverhalten.

Die vorgestellte Methode wurde zur Beschreibung der Messungen der magnetischen Suszeptibilität an CuGeO_3 benutzt. Das dabei verwendete $S = 1/2$ Heisenbergmodell besaß eine starke Kopplung der übernächsten Nachbarn ($\alpha = 0.7$). Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung oberhalb von 14K. Den strukturellen Phasenübergang bei dieser Temperatur zu beschreiben, erfordert eine zusätzliche nicht verschwindende Stärke der alternierenden Wechselwirkung (γ). Durch deren Berücksichtigung könnte der Vergleich der experimentellen Daten mit denen des Kernpolynomverfahrens die genauere Einordnung von CuGeO_3 in das Phasendiagramm der verallgemeinerten Spinleiter unterstützen.

Es ist gezeigt worden, wie wechselwirkende, defektinduzierte Spins die Niedrigenergiestruktur des Spektrums ändern. Eine statistische Verteilung der Defekte reduziert das Spektrum bei niedrigen Energien auf das einer $S = 1/2$ Kette mit statistisch verteilter Stärke der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn (effektives Paar-Modell, vorgeschlagen von [74]). Die numerischen Daten liefern präzise Informationen über die Parameter der effektiven Wechselwirkung und zeigen für ausreichenden Abstand der Defekte ($p \geq 5$) ein rein exponentielles Verhalten der Kopplungsstärke. Desweiteren zeigte sich, daß es ausreichend ist, mit Abweichungen unter 10% bei der Beschreibung des Spektrums des effektiven Paar-Modells Zwei-Spin-Wechselwirkungen zu betrachten. Die Anzahl der defektinduzierten Zustände wächst exponentiell (2^{Lc}) mit der Konzentration c , wie bereits experimentell beobachtet [79].

Mittels des Lieb-Mattis Theorems ist eine Aussage über das Tieftemperaturverhalten der Nullfeldsuszeptibilität der verunreinigten Spinleiter getroffen worden. Es ist eine endliche Curie-Konstante bei einer $1/T$ Divergenz vorausgesagt worden. Die numerischen Werte reichen nicht aus, um einen Wechsel der Curie-Konstanten mit steigender Temperatur zu beobachten.

Aus dem Resultat der Leitern mit zwei Verunreinigungen geht nicht eindeutig hervor, daß ausschließlich Beiträge der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn genügen. Es zeigt sich jedoch bei dem Vergleich der in DMRG-Rechnungen gefundenen Resultate mit dem effektiven Paar-Modell, daß die Beiträge in höherer Ordnung quantitativ nicht relevant sind.

Der Effekt von Verunreinigungen in der vorgestellten Spinverteilung zeigt einige Ähnlichkeiten mit den Ergebnissen, die im Zusammenhang mit dem verunreinigten Haldanesystem gefunden wurden. Es ist nützlich, diese beiden Phäno-

mene zu vergleichen.

In beiden Systemen verteilen die defektinduzierten ungepaarten Spins ihr magnetisches Moment in die angrenzenden Bereiche, und die Eindringtiefe ist bestimmt durch die Korrelationslänge.

Im Haldanefall handelt es sich um einen physikalisch verschiedenen magnetischen Defektspin, der mit dem lokalisierten Teil des ungepaarten Randspins wechselwirkt. Dies führt zu der in ESR-Experimenten beobachteten Aufspaltung des Spektrums.

Im Fall der Spinleiter ist eine unmagnetische Verunreinigung präsent, und der zugehörige ungepaarte Spin teilt sein magnetisches Moment mit dem ihn umgebenden Bereich. Die Ausläufer dieses magnetischen Moments induzieren eine effektive Wechselwirkung und führen zu dem experimentell beobachteten Aufspalten der niederenergetischen Niveaus.

Bei der Interpretation von Neutronenstreuexperimenten an $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ ist festgestellt worden, daß die Beschreibung mit ausschließlich nn Dimerkonfiguration nicht zur Erklärung der Korrelationen ausreicht. Die Auswahl der betrachteten Konfigurationen war durch die Größe der Energielücke bestimmt. Die Erklärung der ferromagnetischen Korrelationen konnte erst durch die numerische Bestimmung des statischen Strukturformfaktors erfolgen. Auch in den Defektkonfigurationen, die keine offensichtlichen, ferromagnetischen Wechselwirkungen enthielten, zeigten sich ferromagnetische Korrelationen. Verantwortlich dafür war die Zerstörung der starken, kurzreichweitigen antiferromagnetischen Korrelationen in der Umgebung der Defekte.

Es konnte gezeigt werden, daß die experimentell beobachteten Energien und ferromagnetischen Korrelationen als Folge von Defektpaaren in freien Spinleitern verstanden werden können.

Anhang A

Normierung

Die Normierung der MP-Zustände stellt eine Bedingung an die Parameter a, b .

Es gilt

$$G_{Leiter} = Tr \prod_{j=1}^L g_j \quad \text{mit} \quad g_j = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_j + b|s\rangle_j & -a\sqrt{2}|t_+\rangle \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle & b|s\rangle_j - a|t_0\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \langle G_{Leiter} | G_{Leiter} \rangle \\ &= Tr_1 Tr_2 \prod_{j=1}^L \langle g_j | g_j \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Es ist zu beachten, daß das Skalarprodukt in den Spinräumen gebildet wird und das Tensorprodukt in den beiden Matrixräumen. Die Indizes an der Spur sollen darauf hinweisen, daß die Spurbildung separat in den beiden Matrixräumen erfolgt.

Das Tensorprodukt zweier g -Matrizen ist

$$T := \langle g_j | g_j \rangle = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 0 & 0 & 2a^2 \\ 0 & b^2 - a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 - a^2 & 0 \\ 2a^2 & 0 & 0 & a^2 + b^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Um das Matrixprodukt über alle T ausführen zu können, muß man T diagonalisieren.

Die entsprechende unitäre Matrix U lautet

$$U := \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

und es folgt

$$D := UTU^T = \begin{pmatrix} 3a^2 + b^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 - a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 - a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b^2 - a^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Die Norm von G lautet somit

$$\mathcal{N} = (3a^2 + b^2)^N + 3 * (b^2 - a^2)^N \quad (\text{A.6})$$

und man erhält durch die Normierungsbedingung $\mathcal{N} = 1$ die Bedingung an die Parameter a, b .

$$3a^2 + b^2 = 1 \quad (\text{A.7})$$

Anhang B

Grundzustandsenergie

Es soll der Erwartungswert der Energie berechnet und bezüglich der Parameter a, b minimiert werden.

$$\frac{\langle G^{0,0} | H | G^{0,0} \rangle}{\langle G^{0,0} | G^{0,0} \rangle} = \frac{E_{var}}{L} \quad (\text{B.1})$$

mit

$$|G^{0,0}\rangle = Tr \prod_{i=1}^N g_i \quad g_j = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_j + b|s\rangle_j & -a\sqrt{2}|t_+\rangle \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle & b|s\rangle_j - a|t_0\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Der Hamiltonoperator wird für verschiedene Bonds separat betrachtet.

$$H = H^{(0)} + \frac{\alpha}{2}H^{(1)} + (1 + \gamma)H^{(2)} \quad (\text{B.3})$$

Da die Vorgehensweise für alle Teile des Hamiltonoperator identisch ist, soll hier nur der $H^{(0)}$ Beitrag berechnet werden.

$$\langle G^{0,0} | H^{(0)} | G^{0,0} \rangle = Tr_1 Tr_2 \sum_i \prod_{j=1}^{i-1} T_j M0_i \prod_{j'=i+2}^N T_{j'} \quad (\text{B.4})$$

mit

$$M0_i := \langle g_i g_{i+1} | h_i^{(0)} | g_{i+1} g_i \rangle \quad (\text{B.5})$$

und

$$H^{(0)} = \sum_{i=1}^N h_i^{(0)}. \quad (\text{B.6})$$

Aufgrund der Translationsinvarianz des MP-Zustandes ist $M0_i$ unabhängig von i und lautet somit in Matrixschreibweise

$$M0 = M0_i = \begin{pmatrix} -2a^2(a^2 + b^2 + ab) & 0 & 0 & -a^2(a^2 + b^2 + 4ab) \\ 0 & -a^2(a - b)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a^2(a - b)^2 & 0 \\ -a^2(a^2 + b^2 + 4ab) & 0 & 0 & -2a^2(a^2 + b^2 + ab) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

Unter Verwendung der in Anhang A eingeführten unitären Transformation folgt dann

$$\langle G^{0,0} | H^{(0)} | G^{0,0} \rangle = Tr_1 Tr_2 \sum_i U D^{i-1} U^T M0_i U D^{N-i-1} U^T \quad (\text{B.8})$$

und man erhält

$$\langle G^{0,0} | H^{(0)} | G^{0,0} \rangle = -N3 (A^4 + 2B^3 \cos \phi + A^2 B^2 \cos^2 \phi) \quad (\text{B.9})$$

$$\text{mit } A = |a| \quad B = |b|. \quad (\text{B.10})$$

Anhang C

Normierung der Anregungen

Die Anregung für die verallgemeinerte Spinleiter lautet unter Berücksichtigung der speziellen Darstellung der Spinmatrizen ($2s^z = -\sigma^z$)

$$|\psi(k)\rangle = \frac{-1}{\sqrt{N}} \text{Tr} \sum_{n=1}^N e^{ikn} \left[\prod_{i=1}^{n-1} g^i \sigma_z^n g^n \prod_{j=n+1}^N g^j \right] \quad (\text{C.1})$$

mit

$$g_j = \begin{pmatrix} b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix}$$

und

$$\tilde{g}^n := 2s_z^n g^n = \begin{pmatrix} b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \\ -\sqrt{2}a|-\rangle_j & -b|s\rangle_j + a|0\rangle_j \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Die Norm ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \langle \psi(k) | \psi(k) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N e^{ik(n-m)} \text{Tr}_1 \text{Tr}_2 \\ &\quad \left\langle \prod_{j=1}^{n-1} g^j \tilde{g}^n \prod_{j'=n+1}^N g^{j'} \mid \prod_{i=1}^{m-1} g^i \tilde{g}^m \prod_{i'=m+1}^N g^{i'} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

In Teil A des Anhangs sind bereits die 4×4 Matrizen T und D eingeführt worden. Für die Berechnung der Norm angeregter Zustände müssen jedoch noch

weitere definiert werden.

$$TS_j := \langle g^j | \tilde{g}^j \rangle = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 0 & 0 & 2a^2 \\ 0 & b^2 - a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 - b^2 & 0 \\ -2a^2 & 0 & 0 & -a^2 - b^2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

$$ST_j := \langle \tilde{g}^j | g^j \rangle = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 0 & 0 & 2a^2 \\ 0 & a^2 - b^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 - a^2 & 0 \\ -2a^2 & 0 & 0 & -a^2 - b^2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.5})$$

$$S_j := \langle \tilde{g}^j | \tilde{g}^j \rangle = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 0 & 0 & 2a^2 \\ 0 & a^2 - b^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 - b^2 & 0 \\ 2a^2 & 0 & 0 & a^2 + b^2 \end{pmatrix} \quad (\text{C.6})$$

Bei der Berechnung ist es zweckmäßig, den Diagonalteil und den Außerdiagonalteil der Summation getrennt zu betrachten.

- Diagonalteil ($n=m$)

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{DT} &= \sum_{n=1}^N Tr_1 Tr_2 T^{n-1} ST^{N-n} \\ &= \sum_{n=1}^N Tr_1 Tr_2 U D^{n-1} U^T S U D^{N-n} U^T \\ &= 1 \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

- Außerdiagonalteil ($n > m$)

$$\mathcal{N}_{ADT1} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{n=m+1}^N Tr_1 Tr_2 e^{ik(m-n)} U D^{n-m-1} U^T g T U D^{N-(n-m)-1} U^T T g \quad (\text{C.8})$$

$$= \frac{1}{e^{-ik} - (b^2 - a^2)} \quad (\text{C.9})$$

- Außerdiagonalteil ($n < m$) (Ergibt sich aus $n > m$ durch Konjugation!)

$$\mathcal{N}_{ADT2} = \frac{1}{e^{ik} - (b^2 - a^2)} \quad (\text{C.10})$$

Somit ergibt sich schließlich die Normierung der angeregten Zustände.

$$\mathcal{N} = \frac{1 - x^2}{1 + x^2 - 2x \cos(k)} \quad (\text{C.11})$$

mit

$$x = b^2 - a^2$$

Anhang D

Anregungsenergien

Es soll der Erwartungswert des Hamiltonoperators in den konstruierten MP-Anregungen berechnet werden.

$$\frac{\langle \psi(k) | H^{(2)} - E_0 | \psi(k) \rangle}{\langle \psi(k) | \psi(k) \rangle} = \Delta(k) \quad (\text{D.1})$$

Die Berechnung erfolgt für alle Teile des Hamiltonoperators analog. Daher wird hier nur der Teil betrachtet, der auf den Diagonalen wirkt. Der Hamiltonoperator ist eine Summe lokaler Operatoren

$$H^{(2)} = \sum_{i=1}^N h_i, \quad (\text{D.2})$$

wobei i die Diagonale bezeichnet. Die g -Matrizen sind ebenfalls auf den Diagonalen definiert, daher wirkt der lokale Hamiltonoperator jeweils nur auf eine g -Matrix.

$$THT := \langle g_j | h_j | g_j \rangle \quad (\text{D.3})$$

$$SHT := \langle \tilde{g}_j | h_j | g_j \rangle \quad (\text{D.4})$$

$$THS := \langle g_j | h_j | \tilde{g}_j \rangle \quad (\text{D.5})$$

$$SHS := \langle \tilde{g}_j | h_j | \tilde{g}_j \rangle \quad (\text{D.6})$$

$$(\text{D.7})$$

Auch hier unterscheiden wir Diagonaleil und Außerdiagonaleil.

- Diagonaleil ($n = m$)

$$\begin{aligned}
\omega_{DT} = & \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Tr_1 Tr_2 [\\
& \sum_{i=1}^{n-1} UD^{i-1} U^T (THT) UD^{n-i-1} U^T SUD^{N-n} U^T \\
& + \sum_{i=n+1}^N UD^{n-1} U^T SUD^{i-n-1} U^T (THT) UD^{N-i} U^T \\
& + UD^{n-1} U^T (SHS) UD^{N-n} U^T] \quad (D.8)
\end{aligned}$$

Es ergibt sich

$$\omega_{DT} = -N \frac{3}{4} x. \quad (D.9)$$

- Außerdiagonaleil ($n > m$)

$$\begin{aligned}
\omega_{DT1} = & \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{ik(n-m)} Tr_1 Tr_2 [\\
& \sum_{i=1}^{m-1} UD^{i-1} U^T THTUD^{m-i-1} U^T STUD^{n-m-1} U^T TSUD^{N-n} U^T \\
& + \sum_{m+1=1}^{n-1} UD^{m-1} U^T U^T STUD^{i-m-1} U^T THTUD^{n-i-1} U^T TSUD^{N-n} U^T \\
& + \sum_{n+1=1}^N UD^{m-1} U^T STUD^{n-m-1} U^T TSUD^{i-n-1} U^T THTUD^{N-i} U^T \\
& + UD^{m-1} U^T SHTUD^{n-m-1} U^T TSUD^{N-n} U^T \\
& + UD^{m-1} U^T STUD^{n-m-1} U^T THSUD^{N-n} U^T] \quad (D.10)
\end{aligned}$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}\omega_{ADT1} &= -N\frac{3}{4}x^2\frac{1}{e^{ik}-x} \\ &- 4a^2b^2\frac{e^{ik}}{(e^{ik}-x)^2}.\end{aligned}\quad (\text{D.11})$$

- Außerdiagonalteil ($n > m$) (Ergebnis aus $n > m$ durch Konjugation!)

$$\begin{aligned}\omega_{ADT2} &= -N\frac{3}{4}x^2\frac{1}{e^{-ik}-x} \\ &- 4a^2b^2\frac{e^{-ik}}{(e^{-ik}-x)^2}.\end{aligned}\quad (\text{D.12})$$

Als Ergebnis erhält man die unnormierte Anregungsenergie vor Subtraktion der Grundzustandsenergie

$$\omega = -N\frac{3}{4}x\frac{1-x^2}{1+x^2-2x\cos(k)} - \frac{a^2b^2}{2}\frac{(1+x^2)\cos(k)-2x}{(1+x^2-2x\cos(k))^2}.\quad (\text{D.13})$$

Wird die Normierung der Anregungen (Anhang C) berücksichtigt und die Grundzustandsenergie subtrahiert, fällt der Term proportional zu N erwartungsgemäß weg und man erhält

$$\frac{\langle\psi(k)|\tilde{H}^{(2)}|\psi(k)\rangle}{\langle\psi(k)|\psi(k)\rangle} = \Delta^{(2)}(k)\quad (\text{D.14})$$

$$= \frac{-b^2}{1-2a^2}\frac{(1+x^2)\cos(k)-2x}{\lambda_k}\quad (\text{D.15})$$

mit

$$\lambda_k = 1+x^2-2x\cos(k) \quad \text{und} \quad x = b^2 - a^2.\quad (\text{D.16})$$

Anhang E

Tripletanregung

Es soll untersucht werden, ob die konstruierte Anregung tatsächlich die Nullprojektion eines Triplets ist. Der Operator s_n^z ist aufgrund der Wahl der Darstellung wiederum gegeben durch $2s^z = -\sigma^z$.

$$|\psi(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^{n-1} g^i 2s_n^z g^n \prod_{j=n+1}^N g^j \right] \quad (\text{E.1})$$

Es reicht aus, zu zeigen, daß

$$|\psi_n\rangle = \prod_{i=1}^{n-1} g^i 2s_n^z g^n \prod_{j=n+1}^N g^j \quad (\text{E.2})$$

die Nullprojektion eines Triplets ist. Die Operatoren der $SU(2)$ im Raum der g -Matrizen sind S^z, S^+, S^- . Sie wirken auf den Produktraum bestehend aus Matrixraum und Spinraum. Die Anwendung der Operatoren $\sum_{i=1}^N S_i^z$ und $\sum_{i=1}^N S_i^+$ auf $|\psi_n\rangle$ gibt gemäß der Konstruktion der g -Matrizen für $i \neq n$ null. Also bleibt zu zeigen, daß die Anwendung des Operators S_n^z auf $s_n^z g^n$ und die zweimalige Anwendung des Operators S_n^+ null ergibt.

Die Anregung lautet

$$2s^z g = exc = \begin{pmatrix} -b|s\rangle_j - a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix}. \quad (\text{E.3})$$

Zuerst wird die z -Komponente der Anregung bestimmt. Der Operator S^z wirkt dabei auf den Matrixraum über den Kommutator als s^z und im Spinraum als z -Komponente der dreidimensionalen Darstellung der $SU(2)$.

$$S^z exc = [s^z, exc] + \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ -\sqrt{2}a|-\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.4})$$

Der Kommutator ergibt

$$\begin{aligned} [s^z, exc] &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -b|s\rangle_j - a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} -b|s\rangle_j - a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ -\sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ -\sqrt{2}a|-\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

und annihiliert den zweiten Term. Damit ist gezeigt, daß die z-Komponente der Anregung tatsächlich verschwindet.

Um festzustellen, ob es sich um die Nullprojektion eines Triplett handelt, wird S^+ zweimal auf exc angewandt.

$$S^+ exc = [s^+, exc] + \begin{pmatrix} -\sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \\ 2a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix} \quad (\text{E.6})$$

Der Kommutator ergibt

$$\begin{aligned} [s^+, exc] &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -b|s\rangle_j - a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} -b|s\rangle_j - a|0\rangle_j & \sqrt{2}a|+\rangle_j \\ \sqrt{2}a|-\rangle_j & b|s\rangle_j - a|0\rangle_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \\ -b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \\ 2b|s\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix}. \quad (\text{E.7})$$

Zusammen mit dem zweiten Term erhält man schließlich

$$S^+exc = 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix}. \quad (\text{E.8})$$

Nochmaliges anwenden von S^+ sollte diesen Zustand, wenn es sich um die +1-Projektion eines Triplets handelt, vernichten.

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^+(\mathcal{S}^+exc) &= [s^+, (S^+exc)] + 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix} \\ &\quad - 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ b|s\rangle_j + a|0\rangle_j & -\sqrt{2}a|+\rangle_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2}a|+\rangle_j & 0 \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

Damit ist gezeigt, daß die konstruierte Anregung s^zg tatsächlich die Nullprojektion eines Triplets ist.

Anhang F

Lokale Magnetisierung im MP-Formalismus

Die lokale Magnetisierung am Platz i ist gegeben durch den Erwartungswert des Operators s_i^z . Die Gesamtmagnetisierung des MP-Zustandes fixieren wir dabei durch die Wahl der Randbedingungen auf die +1 Projektion des Triplets.

$$\langle s_j^z \rangle = \frac{\langle \prod_{i=1}^N g_i | s_j^z | \prod_{i=1}^N g_i \rangle_{1,4}}{\langle \prod_{i=1}^N g_i | \prod_{i=1}^N g_i \rangle_{1,4}} \quad (\text{F.1})$$

Dabei benennt $i, i = 1..N$ die Diagonalen und $j, j = 1..2N$ die Plätze. s_j^z wirkt unterschiedlich auf verschiedenen Holmen.

$$S1_n := s_{2n-1}^z g_n = \begin{pmatrix} \frac{a}{2}|s\rangle_n + \frac{b}{2}|0\rangle_n & -a\frac{1}{\sqrt{2}}a|+\rangle_n \\ -a\frac{1}{\sqrt{2}}a|-\rangle_n & -\frac{a}{2}|s\rangle_n + \frac{b}{2}|0\rangle_n \end{pmatrix} \quad (\text{F.2})$$

$$S2_n := s_{2n}^z g_n = \begin{pmatrix} -\frac{a}{2}|s\rangle_n - \frac{b}{2}|0\rangle_n & -a\frac{1}{\sqrt{2}}a|+\rangle_n \\ -a\frac{1}{\sqrt{2}}a|-\rangle_n & \frac{a}{2}|s\rangle_n - \frac{b}{2}|0\rangle_n \end{pmatrix} \quad (\text{F.3})$$

Damit folgt für den Erwartungswert der lokalen Magnetisierung

$$\langle s_{2n-1}^z \rangle = \frac{\langle g^{n-1} S1_n g^{N-n} | g^{n-1} S1_n g^{N-n} \rangle_{1,4}}{\langle g^N \rangle_{1,4}} \quad (\text{F.4})$$

$$\langle s_{2n}^z \rangle = \frac{\langle g^{n-1} S1_n g^{N-n} | g^{n-1} S2_n g^{N-n} \rangle_{1,4}}{\langle g^N \rangle_{1,4}}. \quad (\text{F.5})$$

Mit

$$\langle S1_n | S1_n \rangle = \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 & a^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -a^2 & 0 & 0 & -ab \end{pmatrix} \quad (\text{F.6})$$

$$\langle S1_n | S2_n \rangle = \begin{pmatrix} -ab & 0 & 0 & a^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -a^2 & 0 & 0 & ab \end{pmatrix} \quad (\text{F.7})$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle s_{2n-1}^z \rangle &= 2 \frac{(T^{n-1} S1_n T^{N-n})_{1,4}}{1 - x^N} \\ &= a(a-b)x^{N-n} + a(a+b)x^{n-1} \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

$$\begin{aligned} \langle s_{2n}^z \rangle &= 2 \frac{(T^{n-1} S2_n T^{N-n})_{1,4}}{1 - x^N} \\ &= a(a+b)x^{N-n} + a(a-b)x^{n-1} . \end{aligned} \quad (\text{F.9})$$

Die lokale Magnetisierung auf den Sprossen s_p^z in der Umgebung eines Defektes ist damit unterschiedlich auf verschiedenen Holmen. Auf dem Holm des Defektes ergibt sich

$$\langle s_p^z \rangle = -\frac{a}{a+b} (-1)^p x^p \quad (\text{F.10})$$

und auf dem gegenüberliegenden

$$\langle s_p^z \rangle = a(a+b) (-1)^p e^{p \ln(|x|)} . \quad (\text{F.11})$$

Die Numerierung auf dem Holm des Defektes ist durch den Übergang von der Zählung der Diagonalen auf die Zählung der Sprossen verändert worden.

Literaturverzeichnis

- [1] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [2] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987); Commun. Math. Phys. **115**, 583 (1988).
- [3] O. Golinelli, Th. Jolicoeur und R. Lacaze, Phys. Rev. B **50**, 3037 (1994).
- [4] S.R. White und D. A. Huse, Phys. Rev. B **48**, 3844 (1993).
- [5] S. Miyashita und S. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 1459 (1993).
- [6] J. P. Renard, M. Verdagner, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, W. G. Stirling, Euro Phys. Lett. **3**, 945 (1987).
- [7] J. P. Renard, M. Verdagner, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W. G. Stirling, C. Vettier, J. Appl. Phys. **63**, 3538 (1988).
- [8] K. Katsumata, H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi, J. P. Renard, Phys. Rev. Lett. **63**, 86 (1989).
- [9] Y. Ajiro, T Goto, H. Kikuchi, T. Sakakibara, T. Inami, Phys. Rev. Lett. **63**, 1424 (1989).
- [10] H. Shiba, T. Sakai, B. Lüthi, W. Palme, M. Sieling, J. of Magnetism and Magnetic Materials **140-144**, 1590 (1995).
- [11] H. Bethe, Z. Physik **71**, 205 (1931).
- [12] J. G. Bednorz und K.A. Müller, Z. Physik B **64**, 188 (1986).
- [13] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).
- [14] L. D. Fadeev und Takhtajan, Phys. Lett. A **85**, 375 (1981).

- [15] A. M. Tselik, Phys. Rev. B **42**, 10499 (1990).
- [16] S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui, Y. Kobayashi, M. Sato, T. Nishioka, M. Kontani und K. Sano, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 2758 (1995).
- [17] K. Ueda, H. Kontani, M. Sigrist, P. A. Lee, Phys. Rev Lett. **76**, 1932 (1995).
- [18] I. Harada und T. Tonegawa in: *Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds*, eds. A. Kotani und N. Suzuki, World Scientific 1993 .
- [19] S. Eggert, Phys. Rev. B **54** 9612 (1996).
- [20] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. B **25** 4925 (1982).
- [21] T. Tonegawa und I. Harada, J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 2153 (1987).
- [22] E. Dagotto und T.M. Rice, Science **271**, 618 (1996).
- [23] T. Siegrist, S. M. Zahurak, D. W. Murphy und S. Roth, Nature **334**, 231 (1988).
- [24] S. Gopalan, T. M. Rice, und M. Sigrist, Phys. Rev. B **49**, 8901 (1994).
- [25] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, und Y. Bando, J. Solid State Chem. **95**, 230 (1991).
- [26] M. Matsuda, K. Katsumata, H. Eisaki, N. Motoyama, S Uchida, S. M. Shapiro, G. Shirane, Phys. Rev. B **54**, 12199 (1996).
- [27] E.Dagotto, J. Riera, D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 5744 (1992).
- [28] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [29] R. S. Eccleston, T. Barnes, J. Brody und J. W. Johnson, Phys. Rev. Lett. **73**, 2626 (1994).
- [30] H. Schwenk, M. Sieling, D. König, W. Palme, S.A. Svyagin, B. Lüthi und R.S. Eccleston, preprint (1996).
- [31] M. Matsuda und K. Katsumata, J. of Magnetism and Magnetic Materials **140-144**, 1671 (1995)
- [32] D. V. Khveshchenko, Phys. Rev. B **50**, 380 (1994).

- [33] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 1029 (1988).
- [34] Z. Hiroi und M. Takano, Nature **377**, 41 (1995).
- [35] A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska, S. Yamamoto, Phys. Rev. B **55**, 3336 (1997).
- [36] S. Brehmer, H.-J. Mikeska, U. Neugebauer, J. Phys. C, **8**, 7161 (1996).
- [37] T. Ami et al., to be published .
- [38] L. F. Mattheiss, Phys. Rev. B **49**, 14050 (1994).
- [39] R. N. Silver und H. Röder, Int. J. of Modern Physics C **5**, 735 (1994).
- [40] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B.I. Halperin und J.P. Renard, Phys. Rev. Letters **65**, 3181 (1990).
- [41] E. M. McCarron, S. M. Shapiro, G. Shirane, M. A. Subramanian, J. C. Calabrese, R. L. Harlow, Mat. Res. Bull **23**, 1355 (1988).
- [42] T. Siegrist, L. T. Schneemeyer, S. A. Sunshine, J. V. Waszczak, R. S. Roth, Mat. Res. Bull **23**, 1429 (1988).
- [43] S.R. White, Phys. Rev. B **53**, 52 (1996).
- [44] R. Chitra, Swapan Pati, H. R. Krishnamurthy, Diptiman Sen und S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995).
- [45] C.K. Majumdar und D.K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1399 (1969).
- [46] K. Nomura und K. Okamoto, J. Phys. A **27**, 5773 (1994).
- [47] G. Castilla, S. Chakravarty und V.J. Emery, Phys. Rev. Lett. **75**, 1823 (1995).
- [48] B.S. Shastry und B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981).
- [49] W. J. Caspers und W. Magnus, Phys. Lett. A **88**, 103 (1982).
- [50] H. Watanabe, Phys. Rev. B **50**, 13442 (1994).
- [51] K. Rommelse, und M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **59**, 2578 (1987).
- [52] S. Takada und H. Watanabe, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 39 (1992).

- [53] Y. Nishiyama, N. Hatano und M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 1967 (1995).
- [54] A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, Europhys. Lett. **24**, 293 (1993).
- [55] B. Frischmuth, B. Ammon und M. Troyer, Phys. Rev. B **54**, 3714 (1996).
- [56] S. R. White, R. M. Noack, und D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994).
- [57] C. Zeng und J.B. Parkinson, Phys. Rev. B **51**, 11609 (1995).
- [58] T. Kennedy und H. Tasaki, Phys. Rev. B **45**, 304 (1992).
- [59] G. Fath, J. Solyom, J. Phys. C **5**, 8983 (1993).
- [60] U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, Z. Physik B **99**, 151 (1996).
- [61] J. K. Cullum und R. A. Willoughby, *Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations Vol. I*, Birkhäuser 1985.
- [62] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera und E.S.Swanson, Phys. Rev. B **47**, 3196 (1993).
- [63] M.C. Cross und D.S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979).
- [64] S. Brehmer, A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska, U. Neugebauer, to be published.
- [65] Y. Fan und M. Ma, Phys. Rev. B **37**, 1820 (1988).
- [66] J. L. Black und V. J. Emery, Phys. Rev. B **23**, 429 (1981).
- [67] K. Okamoto und K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, 433 (1993).
- [68] Jose Riera und Ariel Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995).
- [69] A. Klümper, private communications.
- [70] G. Bouzerar, A. P. Kampf und F. Schönfeld, preprint (1997).
- [71] M. Hase, I. Terasaki und K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
- [72] Y. Motome, N. Katoh, N. Furukawa und M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, No.7 (1996); N. Katoh, Y. Motome, N. Furukawa und M. Imada, J. of low Temp. Phys. **105**, 621 (1996).

- [73] G.B. Martins, E. Dagotto und J.A. Riera, Phys. Rev. B **54**, 16023 (1996).
- [74] M. Sigrist und A. Furusaki, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2385 (1996).
- [75] H.-J. Mikeska, U. Neugebauer, U. Schollwöck, Phys. Rev. B **55**, 2955 (1996).
- [76] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist und P.A. Lee, Phys. Rev. Letters **75**, 4302 (1995).
- [77] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [78] K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 1347, 1939 (1991); J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 895 (1996).
- [79] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, T. Ishida, K. Okuda, M. Nohara und H. Tagaki, preprint (1996) .
- [80] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Mori und K. Kinoshita, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2764 (1996).
- [81] Mikeska et. al. to be published .

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. H.-J. Mikeska für die Vergabe des Themas und die hervorragende Betreuung.

Für die Ermöglichung interessanter und unvergeßlicher Forschungsaufenthalte gilt Herrn Prof. Dr. H.-J. Mikeska mein besonderer Dank.

Weiterhin danke ich Herrn Christian Waldtmann für seine Geduld und seinen Rat bei numerischen Problemen und Herrn Sven Brehmer für fruchtbare Diskussionen.

Ich danke dem RRZN Hannover und dem ZIB Berlin für die Benutzung des Parallelrechners CRAY T3D 256SC.

Lebenslauf

Name Ulrich Neugebauer

Anschrift Quedlinburger Weg 8.c
30419 Hannover
Tel.:0511/758545

Institut für Theoretische Physik
30167 Hannover
Tel.: 0511/762 5523
Fax.: 0511/762 3023

Geburtsdatum 4. Januar 1968

Geburtsort Hannover

Familienstand ledig

Schulbildung Grundschule Glücksburger Weg,
Hannover
1974 – 1978
Orientierungsstufe Büssingweg,
Hannover
1978 – 1980
Gymnasium Herschelschule,
Hannover
1980 – 1987

Schulabschluß Abitur (Note: 2.7)
Juni 1987

Wehrdienst: ArtSpezZug II/1
1.7.1987 – 30.09.1988

Studium: Grundstudium der Physik, Universität Hannover
10.1988 – 10.1990
Vordiplom (Note: 1.5)
Hauptstudium Physik, Universität Hannover
10.1990 – 2.1994

Studienabschluß Diplomphysiker (Note: 1.3)
21.02.94

Promotionsstudium Seit 1.04.94 Doktorand von Prof. Dr. H.-J. Mikeska
und wissenschaftlicher Mitarbeiter
am Institut für Theoretische Physik,
Universität Hannover

Veröffentlichungen U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, Z. Physik B **99**, 151 (1996)
S. Brehmer, H.-J. Mikeska und U. Neugebauer,
J. Phys. C **8**, 7161 (1996),
H.-J. Mikeska, U. Neugebauer und U. Schollwöck,
Phys. Rev. B **55**, 2955 (1996)