

Niederenergetische Anregungen in eindimensionalen Quanten-Antiferromagneten

Vom Fachbereich Physik
der Universität Hannover

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

genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Phys. Sven Brehmer
geb. am 9. November 1967 in Wuppertal

Referent: Prof. Dr. H.-J. Mikeska
Korreferent: Prof. Dr. H.-U. Everts
Tag der Promotion: 10. Dezember 1998

Meinen Eltern

Abstract

In the present work low energy excitations in various antiferromagnetic systems are investigated.

The first part is devoted to the antiferromagnetic Heisenberg chain with two different alternating magnetic ions having spins S_A and S_B . The system can be characterised as a ferrimagnet with a long range ordered ground state. Linear spin wave theory (LSWT) leads to a qualitatively correct description of two excitation branches. The low energy spectrum contains ferromagnetic magnons which are discussed in the introductory chapter. The LSWT results are compared with the numerical data from exact diagonalisation for the case $S_A = 1$ and $S_B = 1/2$.

In the second part of the thesis, the quantum phase transitions from the Néel phase to the Heisenberg phase and from the Néel phase to the Haldane phase for half-odd-integer spins $S = 1/2, 3/2$ and integer spins $S = 1, 2$, respectively, are studied in context of the Haldane conjecture. The models are analysed by means of high-order series expansions for the ground state properties and excitation energies. The expansion parameter is the anisotropy λ where the unperturbed case $\lambda = 0$ corresponds to the Ising model.

For the integer- S systems the following scenario is obtained: The phase transitions from the Néel phase to the Haldane phase are determined by the condensation of the so-called spin zero defects (SZD) at finite anisotropy. These domain wall type excitations can be characterised as $S^z = 0$ states embedded in the antiferromagnetic order. The critical exponents β of the order parameter and η of the correlation function are those of the two-dimensional Ising model.

In contrast to the above scenario, the half-odd-integer $S = 1/2$ chain undergoes the Kosterlitz-Thouless phase transition at the isotropic point. In the case of the $S = 3/2$ chain the critical behaviour of the static structure factor $S^{(zz)}(\pi)$ is consistent with the exponentially divergent correlation length at the isotropic point.

Finally, kink excitations of the $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet chain with nearest and next nearest neighbour interactions (the zigzag chain) are investigated. Here a kink is defined as a free spin $S = 1/2$ mediating two dimerised ground states. The phase diagram of the zigzag chain contains the Majumdar-Ghosh model as well as the $S = 1/2$ spin ladder and the $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet. Starting from the Majumdar-Ghosh model, a two-kink variational wave function with $S_{\text{tot}} = 1$ is constructed. The variational parameter is the characteristic distance between the two kinks. The variational wave function describes the low energy triplet excitation of the *gapped* zigzag chain in a qualitatively correct way. Within this approach, the elementary excitation of the spin ladder as well as the Haldane triplet of the $S = 1$ chain appears as a bound state of two kinks.

The phase diagram of the zigzag chain contains the incommensurate phase where the wave vector of the lowest mode k_0 runs from $k_0 = 0$ to $k_0 = \pi$. At the qualitative level, this behaviour is correctly described by the variational approach.

Keywords: Heisenberg model, spin chains, spin ladders

PACS: 75.10.Jm, 75.50.Ee, 75.40.Mg

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden niederenergetische Anregungen verschiedener eindimensionaler Antiferromagneten untersucht.

Der Heisenberg-Antiferromagnet mit zwei verschiedenen, alternierenden magnetischen Zentren S_A und S_B wird im ersten Teil der Arbeit betrachtet. Dieses System ist ein Ferrimagnet und kann qualitativ korrekt durch lineare Spinwellentheorie (LSWT) beschrieben werden. Das niederenergetische Spektrum wird durch ferromagnetische Magnonen beschrieben, deren Eigenschaften im ersten Kapitel diskutiert werden. Die LSWT-Ergebnisse werden mit numerischen Daten für den Fall $S_A = 1$, $S_B = 1/2$ verglichen.

Vor dem Hintergrund der Haldane'schen Vermutung werden im zweiten Teil dieser Arbeit die Quantenphasenübergänge Néel-Phase \rightarrow Heisenberg-Phase und Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase in Heisenberg-Ising-Antiferromagneten mit den halbzahligen Spins $S = 1/2, 3/2$ beziehungsweise den ganzzahligen Spins $S = 1, 2$ untersucht. Es werden Störungsreihen nach der Anisotropie λ , wobei $\lambda = 0$ dem Ising-Modell entspricht, für Grundzustandserwartungswerte und Anregungsenergien numerisch berechnet.

Für die Modelle mit ganzzahligem S führt die Analyse der Reihenentwicklungen auf folgendes Szenario: Der Quantenphasenübergang Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase wird durch Kondensation sogenannter Spin-Zero-Defekte (SZD) bei endlichen Anisotropien hervorgerufen. Diese Domänenwandanregungen sind als $S^z = 0$ Projektionen in antiferromagnetischer Ordnung definiert. Die kritischen Exponenten β des Ordnungsparameters und η der Korrelationsfunktion entsprechen denen des zweidimensionalen Ising-Modells.

Im Gegensatz dazu durchläuft die integrable $S = 1/2$ Kette am isotropen Punkt $\lambda = 1$ einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang. Für das $S = 3/2$ System deutet das kritische Verhalten des statischen Strukturfaktors $S^{(zz)}(\pi)$ ebenfalls auf eine exponentiell divergierende Korrelationslänge am isotropen Punkt hin.

Thema des letzten Teils dieser Arbeit ist die Untersuchung von Kinks in $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagneten mit alternierender nächster-Nachbar-Wechselwirkung und übernächster-Nachbar-Wechselwirkung (Zick-Zack-Ketten). Kinks sind hier als freie Spins $S = 1/2$ zwischen zwei dimerisierten Grundzuständen definiert. Da das Phasendiagramm der Zick-Zack-Kette das Majumdar-Ghosh-Modell, die Spinleiter und die $S = 1$ Kette enthält, besteht die Möglichkeit, einen Zusammenhang zwischen den Anregungen dieser Systeme herzustellen. Ausgehend vom Majumdar-Ghosh-Modell wird eine 2-Kink-Variationswellenfunktion mit $S_{tot} = 1$ aufgestellt. Variationsparameter ist der charakteristische Abstand der beiden Kinks. Diese Variationswellenfunktion beschreibt die niederenergetische Tripletanregung des numerischen Spektrums in dem Bereich des Phasendiagramms, der durch eine endliche Anregungslücke charakterisiert ist, qualitativ korrekt. Die Tripletanregung der Spinleiter sowie das Haldane-Triplett der $S = 1$ Kette stellen sich als gebundene Zustände zweier Kinks dar. Das Phasendiagramm beinhaltet eine inkommensurable Region, in welcher der Wellenvektor der niedrigsten Mode von $k_0 = 0$ nach $k_0 = \pi$ wechselt. Dieser Wechsel von k_0 wird von der Variationswellenfunktion qualitativ korrekt wiedergegeben.

Schlagworte: Heisenberg-Antiferromagnet, Spinketten, Spinleitern

PACS: 75.10.Jm, 75.50.Ee, 75.40.Mg

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Kapitel 1. Der Ferromagnet	5
Kapitel 2. Der Ferrimagnet	11
2.1 Grundlagen	12
2.2 Lineare Spinwellentheorie	14
2.3 Numerische Resultate	17
2.3.1 Resultate einer Quanten-Monte-Carlo-Simulation	18
2.3.2 Exakte Diagonalisierung	21
Kapitel 3. Der Heisenberg-Ising-Antiferromagnet	25
3.1 Störungstheorie für eindimensionale Spinsysteme	30
3.1.1 Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie	31
3.1.2 Rekursive Störungstheorie	33
3.2 Extrapolation singulärer Potenzreihen	35
3.3 Grundzustandseigenschaften von xxz-Modellen	39
3.3.1 Grundzustandsenergie	39
3.3.2 Ordnungsparameter	41
3.3.3 Domänenwandkonzentrationen	43
3.3.4 Statischer Strukturfaktor	44
3.4 Elementare Anregungen in xxz-Modellen	47
3.4.1 Klassifikation der niederenergetischen Anregungen	47
3.4.2 Domänenwände	51
3.4.3 Magnonen	55
3.4.4 Zusammenhang zwischen Magnonen und Domänenwänden	58
Kapitel 4. $S = 1/2$ Zick-Zack-Ketten	63
4.1 Matrix-Produkt-Variationswellenfunktionen	66
4.1.1 Grundzustand	66
4.1.2 Triplett-Anregung	67
4.2 Grundzustandserwartungswerte	70

4.3	2-Kink-Anregungen	73
4.3.1	Die Linie $\gamma = 0$	73
4.3.2	Der inkommensurable Bereich	76
4.3.3	Leitermodelle	80
	Zusammenfassung	83
	Anhang A. Entwicklung elliptischer Integrale	87
	Anhang B. Algorithmus zur rekursiven Störungstheorie	89
	Anhang C. Tabellierung von Störungsreihen	95
	Anhang D. Energieerwartungswert der 2-Kink-Wellenfunktion	99
	Literaturverzeichnis	105

Einleitung

Die Untersuchungen eindimensionaler Antiferromagneten gehen auf die Arbeit [1] von H. Bethe aus dem Jahr 1931 zurück. In dieser Arbeit stellte H. Bethe eine Vielteilchenwellenfunktion für den $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagneten auf [2], welche in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt auf die sogenannten Bethe-Ansatz-Gleichungen führt. Die Berechnung der Grundzustandsenergie aus den Bethe-Ansatz-Gleichungen gelang L. Hulthén 1938 im thermodynamischen Limes [3].

Die niederenergetischen Anregungen des $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagneten wurden 1962 von J. Des Cloizeaux und J. J. Pearson im Rahmen des Bethe-Ansatz-Formalismus analysiert [4]. Sie konstruierten eine Triplett-Anregung mit der Dispersionsrelation $\epsilon(k) = J\pi/2|\sin(k)|$ und interpretierten diese Anregung als antiferromagnetisches Magnon. Antiferromagnetische Magnonen sind Anregungen, welche durch die Wirkung der lokalen Operatoren $S_q^\pm = \sum_{n=1}^N e^{iqn} S_n^\pm$ auf den antiferromagnetischen Grundzustand erzeugt werden. Im Hinblick auf die von Holstein und Primakoff [38] entwickelte lineare Spinwellentheorie (LSWT), die im Grenzfall $S \rightarrow \infty$ die Dispersion $\omega(k) = J2S|\sin(k)|$ für das antiferromagnetische Magnon ergibt, schien das Ergebnis von J. Des Cloizeaux und J. J. Pearson plausibel. Der Unterschied zwischen dem Quanten-Grenzfall $S = 1/2$ und dem klassischen Grenzfall $S \rightarrow \infty$ resultierte in unterschiedlichen Spinwellengeschwindigkeiten. L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan konnten 1981 jedoch zeigen, daß die von J. Des Cloizeaux und J. J. Pearson berechnete Anregung die untere Grenze eines Kontinuums zweier elementarer Anregungen, sogenannter Spinonen, ist [5]. Spinonen sind $S = 1/2$ Anregungen, die nur in Paaren auftreten und die Dispersionsrelation $\epsilon_{\text{Spinon}}(q) = J\pi/2|\sin(q)|$, $0 \leq q \leq \pi$ besitzen. In Anwesenheit einer Ising-artigen Anisotropie ist das niederenergetische Spektrum durch ein Kontinuum zweier Domänenwände mit einer endlichen Energielücke gegeben [6]. Diese Domänenwände konnten für den Fall starker Ising-artiger Anisotropie als Verbindung der beiden Néel-Zustände, den Grundzuständen des Ising-Modells, charakterisiert werden [7], [8]. Obwohl sich für die beiden Grenzfälle $S = 1/2$ und $S \rightarrow \infty$ unterschiedliche elementare Anregungen ergaben, nahm man ein masseloses Spektrum für den Spin S Heisenberg-Antiferromagneten an. Diese Annahme konnte von I. Affleck und E. Lieb für Systeme mit halbzahligen S bewiesen werden [9].

Entgegen dieser Annahme stellte F. D. M. Haldane 1983 die bemerkenswerte Hypothese auf, daß Heisenberg-Antiferromagneten mit ganzzahligen S eine endliche Energielücke und einen Grundzustand mit exponentiell zerfallenden räumlichen Korrelationen aufweisen [10]. Diese Eigenschaften definieren die sogenannte Haldane-Phase. Haldanes Vermutung beruhte auf einer Abbildung des Heisenberg-Antiferromagneten auf ein nichtlineares Sigma-Modell. Darüberhinaus sagte F. D. M. Haldane für die Spin-Modelle mit

ganzzahligem S einen Quanten-Phasenübergang bei endlicher Ising-artiger Anisotropie mit den kritischen Exponenten des zweidimensionalen Ising-Modells voraus. Im Gegensatz dazu weist der anisotrope $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagnet einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang in die Heisenberg-Phase am isotropen Punkt auf [11], [12]. Diese Phase ist durch algebraisch zerfallenden räumliche Korrelationen und eine verschwindende Anregungslücke charakterisiert. Die Haldane'sche Vermutung bildete die Grundlage für eine Vielzahl experimenteller und theoretischer Arbeiten, die das oben beschriebene Szenario bestätigten. Hervorzuheben ist das Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki-Modell (AKLT-Modell), ein $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagnet mit zusätzlicher biquadratischer, isotroper Spin-Spin-Wechselwirkung [13]. Die Konstruktion dieses Modells basiert auf der Idee von C. K. Majumdar und D. K. Ghosh [14], den Hamilton-Operator als Summe lokaler Projektoren zu formulieren. Der exakte Grundzustand des AKLT-Modells kann in geschlossener Form angegeben werden und besitzt exponentiell zerfallende Korrelationen. Weiterhin konnte die Existenz einer endlichen Anregungslücke bewiesen werden.

Nachdem Anfang der 90'er Jahre antiferromagnetische $S = 1/2$ Heisenberg-Spinleitern in den Mittelpunkt des experimentellen wie auch des theoretischen Interesses gerückt waren [15], gelang es, die Haldane'sche Vermutung auf diese Systeme zu verallgemeinern [16], [17]. Demnach entsprechen Spinleitern mit einer geraden Anzahl von Holmen Heisenberg-Antiferromagneten mit ganzzahligem S , Spinleitern mit einer ungeraden Anzahl von Holmen entsprechen Heisenberg-Antiferromagneten mit halbzahligem S . Die antiferromagnetische $S = 1/2$ Spinleiter mit zwei Holmen (im folgenden als Spinleiter bezeichnet) ist ein Spezialfall einer antiferromagnetischen $S = 1/2$ Heisenberg-Kette mit alternierender nächster-Nachbar-Wechselwirkung (nn) und übernächster-Nachbar-Wechselwirkung (nnn). Dieses Modell wird auch als verallgemeinerte Spinleiter oder Zick-Zack-Kette bezeichnet. Das Phasendiagramm der Zick-Zack-Kette enthält insbesondere den $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagneten, das Majumdar-Ghosh-Modell [14], die Spinleiter sowie den $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagneten. Mit der Untersuchung dieses Phasendiagramms war es möglich zu zeigen, daß die Spinleiter und der $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagnet in derselben Phase liegen [18]. Für den Fall einer homogenen nn-Wechselwirkung und einer hinreichend kleinen nnn-Wechselwirkung ist die Zick-Zack-Kette kritisch, d.h. sie besitzt einen Grundzustand mit algebraisch zerfallenden Korrelationsfunktionen und einer verschwindenden Anregungslücke. Wächst die nnn-Wechselwirkung über einen kritischen Wert hinaus, so durchläuft das System einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang [19], [20].

Unabhängig von der oben geschilderten Entwicklung gelang es Mitte der 80'er Jahre Substanzen mit zwei verschiedenen, alternierenden magnetischen Ionen zu synthetisieren [21]. Solche Substanzen können durch eindimensionale Heisenberg-Antiferromagneten der Form

$$-S_A - S_B - S_A - S_B - S_A - S_B - S_A - S_B -$$

beschrieben werden. Diese ferrimagnetischen Systeme besitzen einen langreichweitig geordneten Grundzustand mit einer makroskopischen Magnetisierung [22].

Die vorliegende Arbeit wurde in vier Kapitel untergliedert.

Im einführenden Kapitel werden die Eigenschaften von 1-Magnon- und 2-Magnonzuständen in Spin S Heisenberg-Ferromagneten wiederholt (siehe z.B. [23]). Anschließend wird im zweiten Kapitel ein antiferromagnetisches System untersucht, dessen elementare Anregungen ausschließlich durch Magnonen gegeben sind. Es ist dies der Heisenberg-Antiferromagnet mit zwei verschiedenen, alternierenden magnetischen Zentren S_A und S_B . Es wird lineare Spinwellentheorie angewendet, die auf ein qualitativ korrektes physikalisches Bild zweier Anregungswege führt. Magnonanregungen, die sich durch Reduktion der Grundzustandsmagnetisierung um eine Einheit ergeben, werden mit den Magnonen des Heisenberg-Ferromagneten verglichen. Für den Quanten-Grenzfall $S_A = 1$ und $S_B = 1/2$ wird das niederenergetische Spektrum numerisch mit einem Lanczos-Algorithmus berechnet und mit den im Grenzfall $S \rightarrow \infty$ gültigen LSWT-Resultaten verglichen.

Die Untersuchungen des dritten Kapitels schließen vor dem Hintergrund der Haldane'schen Vermutung an die Arbeit [24] von R. R. P. Singh an. Es werden Störungsreihen für Heisenberg-Ising-Modelle (xxz-Modelle) mit $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ berechnet. Entwicklungsparameter ist die Ising-artige Anisotropie λ , wobei $\lambda = 0$ dem Ising-Modell entspricht. Diese Störungsreihen ermöglichen eine Analyse der Quanten-Phasenübergänge Néel-Phase \rightarrow Heisenberg-Phase für $S = 1/2, 3/2$ und Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase für $S = 1, 2$. Zu diesem Zweck werden Reihenentwicklungen für Grundzustandserwartungswerte (Ordnungsparameter, statischer Strukturfaktor), antiferromagnetische Magnonen und niederenergetische Domänenwände ermittelt. Die Extrapolation der Reihen mittels Padé-Approximanden und D-log-Padé-Approximanden führt auf kritische Punkte und kritische Exponenten. Es wird insbesondere untersucht, welche Rolle den Domänenwandanregungen in Modellen mit halbzahliger beziehungsweise ganzzahliger Spin bei den Quanten-Phasenübergängen zukommt. Abschließend wird der Zusammenhang zwischen antiferromagnetischen Magnonen (im folgenden als Magnonen bezeichnet) und Domänenwänden diskutiert.

Im letzten Kapitel wird ein Zusammenhang zwischen der elementaren Anregung des $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagneten, die als Haldane-Triplett bezeichnet wird, der elementaren Anregung der $S = 1/2$ Spinleiter und der des Majumdar-Ghosh-Modells hergestellt. Zu diesem Zweck wird das Phasendiagramm der Zick-Zack-Kette untersucht, was an die Arbeit [18] von S. R. White anschließt. Vom Majumdar-Ghosh-Modell ausgehend wird zunächst eine Singlett-Variationswellenfunktion aufgestellt, die den Grundzustand in der Spinflüssigkeitsphase, die durch exponentiell zerfallende Korrelationen definiert ist, beschreiben kann. Die von B. S. Shastry und B. Sutherland konstruierten Kinks stellen eine hervorragende Näherung zur Beschreibung der elementaren Anregungen des Majumdar-Ghosh-Modells dar [25]. Diese Kinks bilden den Ausgangspunkt einer 2-Teilchenwellenfunktion, die durch einen Parameter - die Ausdehnung der Bindung der beiden Kinks - charakterisiert ist. Diese Wellenfunktion, die den Gesamtspin $S_{tot} = 1$ als gute Quantenzahl besitzt, ist orthogonal zu der Singlett-Variationswellenfunktion des Grundzustands. Aus diesem Grund wird die 2-Teilchenwellenfunktion als Variationswellenfunktion mit dem Variationsparameter ξ

zur Beschreibung der elementaren Anregungen in der Spinflüssigkeitsphase des Phasendiagramms herangezogen.

KAPITEL 1

Der Ferromagnet

Der eindimensionale isotrope Heisenberg-Ferromagnet mit periodischen Randbedingungen wird durch den Hamilton-Operator

$$H = -J \sum_{n=1}^N \left[S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right] \quad J > 0, \quad \vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1 \quad (1.1)$$

beschrieben [2]. Die Operatoren S_n^α , $\alpha = +, -, z$ sind Spinoperatoren, d.h sie erfüllen die Drehimpulsalgebra mit $\{S(S+1), m = -S, (S-1), \dots, (S-1), S\}$ als Eigenwerten für die Operatoren $\{\vec{S}_n^2, \hat{S}_n^z\}$. Energieeigenwerte sollen in Einheiten des Austauschintegrals ($J/\hbar^2 \rightarrow 1$), Längen in Einheiten der Gitterkonstante a angegeben werden. Der Hamilton-Operator vertauscht, bedingt durch seine Rotationssymmetrie, mit dem Quadrat des Gesamtspins \vec{S}_{tot}^2 , $\vec{S}_{tot} = \sum_{n=1}^N \vec{S}_n$. Weitere Erhaltungsgrößen sind der Magnetisierungsoperator $\hat{S}_{tot}^z = \sum_{n=1}^N S_n^z$, dessen Eigenwerte mit S_{tot}^z bezeichnet werden, und der Translationsoperator T ($\vec{S}_n T = T \vec{S}_{n+1}$), dessen Eigenwerte durch $\exp(ik)$ gegeben sind. Dabei bezeichnet die Quantenzahl k den Wellenvektor. Die Zustände werden hier durch die S^z -Projektionen m an jedem Platz dargestellt. Für $S = 1/2$ werden die Quantenzahlen m oftmals durch Pfeile repräsentiert ($m = \pm 1/2 \hat{=} \uparrow, \downarrow$).

Die Physik dieses Systems ist im wesentlichen verstanden [23]: Der vollständig polarisierte Zustand $|S_{tot} = N/2, S_{tot}^z = N/2\rangle = |S, S, \dots S\rangle$ ist trivialerweise Eigenzustand von (1.1). Indem man (1.1) zu

$$H = - \sum_{n=1}^N \left[\vec{S}_n + \vec{S}_{n+1} \right]^2 + const$$

umschreibt, erkennt man, daß $|S, S, \dots S\rangle$ den größten Eigenwert von $-H$ liefert und damit der Grundzustand von (1.1) ist. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Hamilton-Operators ist jeder Zustand des Multipletts $\{S_{tot} = N/2, S_{tot}^z = -N/2 \dots N/2\}$ Grundzustand des Ferromagneten. Da der Grundzustand $|S_{tot} = N/2, S_{tot}^z = N/2\rangle$ die kontinuierliche Symmetrie des Hamilton-Operators bricht, findet das Goldstone-Theorem Anwendung [26]: Zu jeder gebrochenen kontinuierlichen Symmetrie existiert eine masselose Mode. Im Fall des Ferromagneten läßt sich diese Anregung durch *Twisten* des Operators S_{tot}^- einfach konstruieren:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{ikn} |S, \dots, S, (S-1)_n, S, \dots S\rangle \quad k = \frac{2\pi}{N} l, \quad l = 1, \dots, N-1 \quad (1.2)$$

Diese Anregung wird als Magnon oder Spinwelle bezeichnet und hat die Dispersion $\omega(k) = 2S(1 - \cos(k))$, wobei $\omega(k)$ die Energiedifferenz zur Grundzustandsenergie ist.

Für den Fall $S = 1/2$ kann das Spektrum mittels Bethe-Ansatz [1], [27] vollständig berechnet werden. Die Anregungen werden durch sogenannte *Strings* klassifiziert, die wiederum Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen im thermodynamischen Limes sind (eine Diskussion der Bethe-Ansatz-Gleichungen des Ferromagneten befindet sich in [27]). Ein $(2M+1)$ -String ist durch die Punktmenge $\{\lambda_m = x + im \mid x \in \mathbb{R}, m = -M, \dots, M, m \in \frac{1}{2} \cdot \mathbb{N}\}$ definiert und bestimmt den Impuls und die Anregungsenergie durch die Gleichungen:

$$p(\lambda_{-M}, \dots, \lambda_M) = -2 \arctan \left(\frac{x}{M + \frac{1}{2}} \right) + \pi \quad (1.3)$$

$$h(\lambda_{-M}, \dots, \lambda_M) = \frac{M + \frac{1}{2}}{x^2 + (M + \frac{1}{2})^2} \quad (1.4)$$

Ein String der Länge $2M + 1$ beschreibt einen gebundenen Zustand von $2M + 1$ Magnonen, wobei $M = 0$ dem Zustand (1.2) für $S = 1/2$ entspricht. Betrachtet man nun einen Unterraum mit $S_{tot}^z = N/2 - l$, so lassen sich die Anregungen als Streuzustände ($M = 0$) und gebundene Zustände ($M > 0$) von l Magnonen charakterisieren. Im Intervall $x < \infty$ beziehungsweise $p(\lambda_{-M}, \dots, \lambda_M) > 0$ in Formel (1.3) liegen die gebundenen Zustände für alle Wellenvektoren unter dem Kontinuum der Streuzustände.

Für allgemeine Werte des Spins S kann die Energie und die Wellenfunktion im $S_{tot}^z = NS - 2$ Unterraum (zwei Magnonen) berechnet werden. Zunächst soll die Wellenfunktion für den Fall $S = 1/2$ diskutiert werden:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N e^{ikn} \left(\sum_{r=1}^{N/2-1} a_r |n, r\rangle + a_0 |n, 0\rangle \right) \quad (1.5)$$

$$|n, r\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow_n \uparrow \dots \uparrow \downarrow_{n+1+r} \uparrow \dots \uparrow\rangle \quad (1.6)$$

$$|n, 0\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow_n \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$$

Die Schrödingergleichung führt auf das Gleichungssystem:

$$0 = a_0(1 - \omega) + \frac{a_1}{2}(1 - e^{-ik}) \quad (1.7)$$

$$0 = \frac{a_0}{2}(1 - e^{ik}) + a_1(2 - \omega) + \frac{a_2}{2}(1 - e^{-ik}) \quad (1.8)$$

$$0 = a_r(2 - \omega) + \frac{a_{r-1}}{2}(1 - e^{ik}) + \frac{a_{r+1}}{2}(1 - e^{-ik}) \quad r \geq 2 \quad (1.9)$$

Die Gleichungen (1.9) beschreiben zwei unabhängig propagierende Magnonen und können mit dem Ansatz $a_r = a^\pm e^{\pm iqr}$ gelöst werden. An dieser Stelle ist es sinnvoll, Schwerpunkts- und Relativkoordinate einzuführen: $k_s = k$, $q_r = q - k/2$. Aus (1.9) ergibt sich somit die Anregungsenergie

$$\omega(k, q_r) = 2 - 2 \cos(q_r) \cos(k/2) \quad (1.10)$$

für das 2-Magnonenkontinuum. Zur Untersuchung gebundener Zustände setzt man für den Relativimpuls einen nichtverschwindenden Imaginärteil an: $a_r^\pm = a^\pm e^{i(k/2 \pm (\tilde{q}_r + i\kappa_r))r}$. Das negative Vorzeichen im Exponenten führt auf unphysikalische Amplituden. Aus der Forderung $\Im(\omega(k, \tilde{q}_r, \kappa_r)) = 0$ ergibt sich $\tilde{q}_r = 0, \pi$. Gebundene Zustände, die energetisch *unter* dem Kontinuum liegen, erfordern $\tilde{q}_r = \pi$ und damit $\omega(k, \kappa_r) = 2(1 - \cosh(\kappa_r) \cos(k/2))$. Mit der Ersetzung $V = e^{-\kappa_r}$ erhält man aus dem *lokalen* Gleichungssystem (1.7, 1.8) eine Determinante zur Bestimmung der möglichen Werte für V .

$$\begin{vmatrix} (1 - \omega) & -V \cos(k/2) \\ \cos(k/2) & V^2 \cos(k/2) - V(2 - \omega) \end{vmatrix} = \frac{\cos(k/2)}{V} (V - \cos(k/2)) = 0$$

$$\Rightarrow V = \cos(k/2), \quad \omega_b(k) = \sin^2(k/2), \quad \xi = 1/\kappa_r = -\frac{1}{\ln(\cos(k/2))}$$

Die Energie des gebundenen Zustandes $\omega_b(k)$ liegt für alle $k > 0$ unter dem Kontinuum. Die charakteristische Länge $\xi(k)$ beschreibt die Ausdehnung des räumlichen Bereiches, über den die beiden gebundenen Magnonen verteilt sind (Bindungslänge der Magnonen). Wie in Abb. (1.1) dargestellt divergiert $\xi(k) \propto 1/k^2$ für $k \rightarrow 0$, d.h. die Bindungsenergie geht gegen null, die gebundenen Zustände fallen mit dem Kontinuum zusammen. Für die Wellenfunktion des gebundenen Zustands erhält man:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{N} \sum_{R=1}^N e^{ikR} |\psi_R\rangle, \quad |\psi_R\rangle = \sqrt{1 - e^{-2/\xi(k)}} \sum_{r=0}^{N/2} e^{-2r/\xi(k)} |R, r\rangle \quad (1.11)$$

Betrachtet man den Erwartungswert

$$\langle \psi_R | S_n^z | \psi_R \rangle = 1/2 \sqrt{1 - e^{-2/\xi(k)}} (1 - e^{-2|n-R|/\xi(k)}) \quad , \quad |n - R| = 1/2, 3/2, \dots,$$

so erinnern die exponentiell abfallenden Flanken dieser Verteilung an die Solitonlösung des klassischen Ferromagneten (siehe [23] und Referenzen darin). In diesem Bild entspricht die charakteristische Länge $\xi(k)$ der Pulsbreite des Solitons. Tatsächlich gilt auch für die klassische Lösung die Dispersion $\omega(k) \propto \sin^2(k/2)$. Es ist jedoch nicht sinnvoll, die Analogie zur klassischen Lösung überzustrapazieren, da die Zustände $|\psi_R\rangle$ keine Eigenvektoren zu (1.1) sind.

Zur Berechnung des gebundenen 2-Magnonzustandes für den $S > 1/2$ Ferromagneten muß der Ansatz (1.7) zu

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \left(\sum_{r=1}^{N/2} a_r |n, r\rangle + a_0 |n, 0\rangle + \tilde{a}_0 |n\rangle_1 \right) \quad (1.12)$$

$$|n, r\rangle = |S \dots S (S-1)_n S \dots S (S-1)_{n+1+r} S \dots S\rangle \quad (1.13)$$

$$|n, 0\rangle = |S \dots S (S-1)_n (S-1) S \dots S\rangle \quad (1.14)$$

$$|n\rangle_1 = |S \dots S (S-2)_n S \dots S\rangle \quad (1.15)$$

erweitert werden. Die Rechnung verläuft analog zum $S = 1/2$ Fall. Das *lokale* Gleichungssystem führt auf die Determinante einer 3×3 Matrix, die folgendes charakteristisches Polynom zur Bestimmung der möglichen $\kappa_r(k)$ beziehungsweise $\xi(k)$ Werte liefert:

$$V^3 + 2 \cos(k/2)(S - 1)V^2 + V - 2S \cos(k/2) = 0, \quad V = e^{-\kappa r} \quad (1.16)$$

$$\omega_b(k) = 2S \left[2 - \left(V(k) + \frac{1}{V(k)} \right) \cos \left(\frac{k}{2} \right) \right], \quad S > \frac{1}{2} \quad (1.17)$$

Für alle S existiert genau eine reelle Lösung. Beispielsweise nimmt diese Lösung für $S = 1$ die kompakte Form

$$V(k) = A(k)/3 - 1/A(k), \quad A(k) = \left(27 \cos(k/2) + 3\sqrt{3 + 81 \cos^2(k/2)} \right)^{1/3}$$

an. Die charakteristischen Längen $\xi(k) = -1/\ln(V(k))$ dieser gebundenen Zustände sind für verschiedene Werte des Spins in Abbildung (1.1) dargestellt.

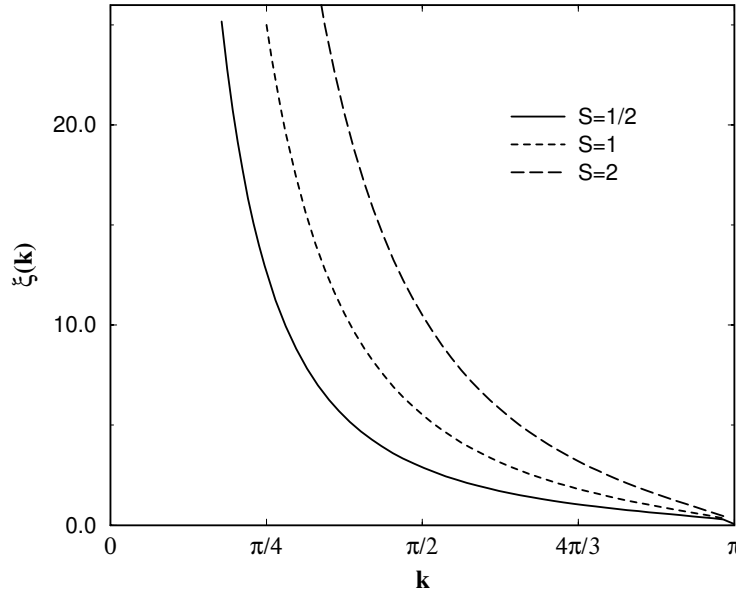


Abbildung 1.1: Charakteristische Längen $\xi(k)$ für gebundene 2-Magnonzustände im Unterraum $S_{tot}^z = NS - 2$. Für $k \rightarrow 0$ divergieren die $\xi(k)$.

Der Wellenvektor $k = \pi$ nimmt eine besondere Position ein: Das Polynom (1.16) reduziert sich zu $V(V^2 + 1) = 0$, die beiden Magnonen sind maximal gebunden ($\xi = 0$). Die Wellenfunktion nimmt eine sehr einfache Form an:

$$|\psi_{k=\pi}\rangle = \sum_{n=1}^N (-1)^n |n, 0\rangle \quad \forall S \quad (1.18)$$

Die Energie dieses Zustands entspricht der Energie des Ising-Anteils ($\sum_n S_n^z S_{n+1}^z$) von (1.1) $\omega(\pi)/(2S) = \omega^{(\text{Ising})} = 2 - 1/(2S)$.

Für große Werte des Spins S verringert sich die Bindungsenergie, was sich in größeren ξ -Werten für festes k äußert. Gleichzeitig *schmiegen* sich die Dispersionsrelationen der gebundenen Zustände dem Kontinuum ($\xi \rightarrow \infty$) an. Im klassischen Grenzfall $S \rightarrow \infty$ reduziert sich (1.16) zu $V^2 - 1 = 0 \Rightarrow \kappa_r = 0$, d.h. es existieren keine gebundenen Zustände (bis auf den Zustand (1.18) für $k = \pi$!). Dies ist konsistent mit der linearen Spinwellentheorie für den Ferromagneten (siehe z.B. [23]). Eine anschauliche Erklärung dieser Tatsache ergibt sich aus den $\omega^{(\text{Ising})}$ -Energien der Zustände (1.13), (1.14) und (1.15): Die Energie $\omega^{(\text{Ising})}$ zweier nicht benachbarter Magnonen beträgt $4S$. Benachbarte Magnonen senken diese Energie auf $4S(1 - 1/S)$ ab und ermöglichen somit den gebundenen Zustand. Springen nun beide Magnonen auf einen Platz (was für $S = 1/2$ nicht möglich ist), so findet keine weitere Absenkung der Energie statt, die Energie $\omega^{(\text{Ising})}$ beträgt wiederum $4S$. Für $S \rightarrow \infty$ verschwindet die Absenkung der Energie $4S(1 - 1/S) \rightarrow 4S$ des Zustandes $|n, 0\rangle$, die Bindung der beiden Magnonen bricht auf ($\xi \rightarrow \infty$).

KAPITEL 2

Der Ferrimagnet

Thema dieses Kapitels ist die Untersuchung eindimensionaler Heisenberg-Antiferromagneten mit zwei verschiedenen, alternierenden magnetischen Zentren (vgl. Abb. (2.1)). Diese Systeme werden auch als *gemischte* antiferromagnetische Spinketten bezeichnet. Mit den Me-

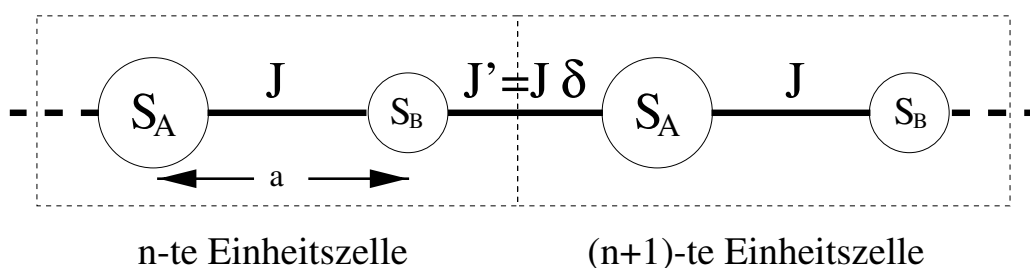


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung eines eindimensionalen Ferrimagneten.

thoden der anorganischen Molekularchemie gelang es 1981 erstmals ferrimagnetische Spinketten zu synthetisieren (einen Übersichtsartikel findet man in [21]). Die erste strukturell realisierte Substanz ist $\text{CuMn}(\text{S}_2\text{C}_2\text{O}_2)_2 \cdot 7.5 \text{ H}_2\text{O}$, wobei die paramagnetischen Ionen Mn^{2+} ($S = 5/2$) und Cu^{2+} ($S = 1/2$) die magnetischen Zentren bilden [22]. Darüberhinaus gelang es 1988 ferrimagnetische Ketten mit alternierender Wechselwirkung J, J' (vgl. Abbildung (2.1)) mit Mangan und Kupfer als magnetischen Zentren herzustellen [28]. Eine ganz andere Motivation zur Untersuchung *gemischter* antiferromagnetischer Spinketten ergab sich vor dem Hintergrund integrierbarer Modelle. Die Quanten-Inverse-Streumethode konnte auf Systeme mit verschiedenen Spins angewandt werden. Im Rahmen dieses Formalismus konstruierten de Vega und Woynarovich 1992 eine Familie integrierbarer *gemischter* Spinketten [29]. Der ferrimagnetische Aspekt tritt bei diesen Arbeiten jedoch in den Hintergrund, da die Hamilton-Operatoren dieser Systeme über die Heisenberg-Wechselwirkung hinaus komplizierte 3-Platz-Wechselwirkungen enthalten.

Der eindimensionale Heisenberg-Ferrimagnet mit periodischen Randbedingungen wird durch den Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{n=1}^L \left[\vec{S}_n \vec{s}_n + \delta \vec{s}_n \vec{S}_{n+1} \right] \quad J > 0, \delta = 1, \vec{S}_{L+1} = \vec{S}_1, \vec{s}_{L+1} = \vec{s}_1, \quad (2.1)$$

der schematisch in Abb. (2.1) dargestellt ist, beschrieben. Das S_A -Untergitter wird durch die Spinoperatoren \vec{S} mit $S_A = S = 1$, $\langle S^z \rangle = (\uparrow, 0, \downarrow)$ definiert. Entsprechend enthält das S_B -Untergitter die $S_B = s = 1/2$, $\langle s^z \rangle = (\uparrow, \downarrow)$ Spinoperatoren \vec{s} . L bezeichnet die Anzahl der Einheitszellen, $N = 2L$ die Anzahl der Spins. Dieser isotrope Hamilton-Operator vertauscht wie (1.1) mit \vec{S}_{tot}^2 , dem Magnetisierungsoperator \hat{S}_{tot}^z und dem durch $(\vec{S}_n \vec{s}_n)T = T(\vec{S}_{n+1} \vec{s}_{n+1})$ definierten Translationsoperator. Energieeigenwerte werden in Analogie zum ersten Kapitel in Einheiten des Austauschintegrals J angegeben, Längen in Einheiten der magnetischen Einheitszelle $2a$. Die Berechnung thermodynamischer Größen, insbesondere der Suszeptibilität waren Gegenstand der ersten theoretischen Untersuchungen dieses Systems. Dabei wurde einerseits exakte Diagonalisierung von bis zu 10 Spins [30], sowie eine Näherungsmethode, bei welcher der *lange* Spin S_A als klassische Größe behandelt wird [22], verwendet. In jüngeren Arbeiten zu diesem Thema wurden die Grundzustandsordnung, elementare Anregungen sowie die Thermodynamik untersucht ([31], [32], [33], [34], [35], [36]).

2.1 Grundlagen

Der Gesamtspin $S_{tot}^{(Gz)}$ des Grundzustands eines Heisenberg-Modells auf einem bipartiten Gitter mit antiferromagnetischer Wechselwirkung zwischen den Untergittern ist gemäß dem Lieb-Mattis-Theorem [37] durch $S_{tot}^{(Gz)} = |\tilde{S}_A - \tilde{S}_B|$ bestimmt. Dabei bezeichnen \tilde{S}_A, \tilde{S}_B die maximalen Gesamtspinwerte der beiden Untergitter. Für den Fall des *Quanten*-Ferrimagneten (2.1) ergibt sich damit $S_{tot}^{(Gz)} = L/2$, was eine $(L + 1)$ -fache Entartung des Grundzustands zur Folge hat. Aus diesem ersten Ergebnis lassen sich folgende Schlüsse ziehen:

- In Analogie zum Ferromagneten bricht der Grundzustand die Rotationssymmetrie des Hamilton-Operators. Daraus läßt sich in Analogie zum ersten Kapitel auf die Existenz einer masselosen Anregung schließen [26]. Diese Anregung sollte in Unterräumen mit $S_{tot}^z < L/2$ auftreten. Diese Unterräume werden im folgenden als *ferromagnetischen Zweig* bezeichnet.
- Im Gegensatz zum Ferromagneten ist der langreichweitig geordnete Zustand $|\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow\rangle$ kein Grundzustand, da er kein Eigenzustand zum Operator \vec{S}_{tot}^2 ist.

Für den Fall eines alternierenden Ferrimagneten $J > J'$ bzw. $\delta < 1$ behält das Lieb-Mattis-Theorem seine Gültigkeit ($J < J'$ bzw. $1/\delta < 1$ beschreibt ebenfalls den alternierenden Ferrimagneten). Tatsächlich ist der Fall starker Dimerisierung $\delta \ll 1$ sehr instruktiv zum Verständnis des ferromagnetischen Zweiges. Es erweist sich als sinnvoll, die Zustände als Dubletts und Quartetts der Einheitszellen darzustellen:

$$\begin{aligned} \text{Dubletts} & : |D_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|0 \uparrow\rangle - \sqrt{2} |\uparrow \downarrow\rangle \right) & |D_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|0 \downarrow\rangle - \sqrt{2} |\downarrow \uparrow\rangle \right) \\ \text{Quartetts} & : |Q_3\rangle = |\uparrow \uparrow\rangle & |Q_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2} |0 \uparrow\rangle + |\uparrow \downarrow\rangle \right) \end{aligned}$$

$$|Q_{-3}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad |Q_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sqrt{2}|0\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

Für $\delta \ll 1$ liegen die Quartettzustände energetisch sehr hoch. Der Grundzustand und die niederenergetischen Anregungen können durch Dublettzustände, die effektive Spins $S = 1/2$ darstellen, beschrieben werden. Der Hamilton-Operator (2.1) weist im Dublett-Unterraum ausschließlich ferromagnetische Wechselwirkungen auf:

$$\langle D_+ D_+ | H | D_+ D_+ \rangle = \langle D_- D_- | H | D_- D_- \rangle = -\delta \frac{1}{9} + \text{const} \quad (2.2)$$

$$\langle D_+ D_- | H | D_+ D_- \rangle = \langle D_- D_+ | H | D_- D_+ \rangle = \delta \frac{1}{9} + \text{const} \quad (2.3)$$

$$\langle D_+ D_- | H | D_- D_+ \rangle = \langle D_- D_+ | H | D_+ D_- \rangle = -\delta \frac{2}{9} + \text{const} \quad (2.4)$$

Die Konstanten ergeben sich aus den Wechselwirkungen innerhalb der Elementarzellen. Jedes Dublett trägt mit der Energie J bei. Die Matrixelemente (2.2-2.3) führen auf eine effektive Wechselwirkungsstärke von $J_{eff} = \delta 4/9$. Auf diese Weise können der Grundzustand und die niederenergetischen Anregungen des stark dimerisierten Ferrimagneten mit dem Grundzustand und den Magnonanregungen des Ferromagneten identifiziert werden. Für die Grundzustandsenergie und die Magnondispersion folgt:

$$E_{(Gz)} = -L \left(1 + \frac{\delta}{9} \right) \quad \omega_{f\text{-mag}}(k) = \delta \frac{4}{9} (1 - \cos(k)) \quad (2.5)$$

Die Goldstone-Mode des Ferrimagneten wird in diesem Grenzfall also durch eine ferromagnetische Spinwelle beschrieben. Die Energieausdrücke (2.5) können natürlich als die 1-te Ordnung einer Störungsentwicklung in δ betrachtet werden. Im *antiferromagnetischen Zweig*, d.h. für Magnetisierungen $\geq L/2$, läßt sich eine Spinwelle auf folgende Weise konstruieren:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L |D_+\rangle \dots |Q_3\rangle_n \dots |D_+\rangle \quad , \quad S_{tot}^z = \frac{L}{2} + 1 \quad (2.6)$$

Die Dispersionsrelation dieser Anregung nimmt in 1-ter Ordnung Störungstheorie in δ die Form

$$\omega_{af\text{-mag}}(k) = \frac{3}{2} + \delta \left(\frac{7}{18} - \frac{2}{3} \cos(k) \right) + \mathcal{O}(\delta^2) \quad , \quad \omega_{af\text{-mag}}(0)|_{\delta=1} = \frac{11}{9} \quad (2.7)$$

an. Im gesamten Intervall $0 \leq \delta \leq 1$ hat diese Spinwelle eine verhältnismäßig große Anregungslücke. Obwohl dies nur ein Resultat der Störungstheorie in 1-ter Ordnung ist, wird sich herausstellen, daß (2.7) die Dispersion dieses Magnons, welches im folgenden als *antiferromagnetisches Magnon* bezeichnet werden soll, qualitativ korrekt beschreibt. Abschließend sei darauf hingewiesen, daß die Bezeichnung *antiferromagnetischer Zweig* beziehungsweise *antiferromagnetisches Magnon* sich ausschließlich auf den Wert der Magnetisierung bezieht. Es ist keinesfalls richtig zu behaupten, die Anregungen des Ferrimagneten würden für $S_{tot}^z \geq L/2$ qualitativ mit denen eines Antiferromagneten übereinstimmen. Vielmehr stellt das antiferromagnetische Magnon des Ferrimagneten eine optische Mode dar.

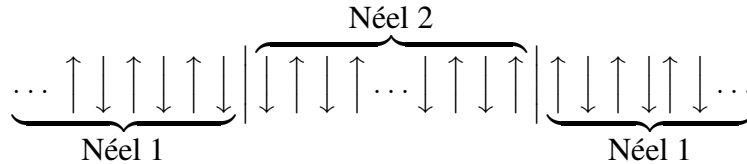
2.2 Lineare Spinwellentheorie

Die lineare Spinwellentheorie (LSWT) kann ein System qualitativ korrekt beschreiben, wenn der exakte Grundzustand des Systems genau wie der klassische Grundzustand langreichweitig geordnet ist. Ist dies der Fall, so kann die Energieabsenkung des Grundzustandes durch Quantenfluktuation, sowie die Dispersion von Spinwellen für den Grenzfall $1/S \ll 1$ richtig wiedergegeben werden. Zunächst werden die Spinoperatoren gemäß der Holstein-Primakoff-Transformation [38] durch Boseoperatoren beschrieben, anschließend nach $1/S$ entwickelt. Ausgehend vom klassischen Grundzustand ergibt sich folgende Transformation ([23], [31], [33]):

$$\text{A : } S_n^z = gS - a_n^\dagger a_n \quad S_n^\dagger = \sqrt{2gS} a_n \sqrt{1 - \frac{a_n^\dagger a_n}{2gS}} \xrightarrow{S \rightarrow \infty} \sqrt{2gS} a_n \quad (2.8)$$

$$\text{B : } s_n^z = -S + b_n^\dagger b_n \quad s_n^\dagger = \sqrt{2S} b_n^\dagger \sqrt{1 - \frac{b_n^\dagger b_n}{2S}} \xrightarrow{S \rightarrow \infty} \sqrt{2S} b_n^\dagger \quad (2.9)$$

Der Parameter g ist durch $g = (\text{Länge A-Spin})/(\text{Länge B-Spin})$ definiert. Der Grenzfall $g \rightarrow 1$ entspricht der LSWT für den Antiferromagneten. Der eindimensionalen Antiferromagnet kann aus folgendem Grund nicht durch LSWT beschrieben werden: Die beiden Néel-Zustände sind in der Näherung (2.9) entkoppelt, d.h. Matrixelemente der Art $\langle \uparrow_n, \downarrow_{n+1} | (S_n^+ S_{n+1}^-)^{2S} | \downarrow_n, \uparrow_{n+1} \rangle$; $\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S$ verschwinden stets. Somit kann der Transversalteil des Hamilton-Operators keine Domänenwände, d.h. Zustände vom Typ



erzeugen. Es wird jedoch im nächsten Kapitel gezeigt, daß gerade diese Anregungstypen die Untergitterordnung des isotropen Antiferromagneten zerstören und die Dynamik bei $T = 0$ bestimmen. Im Ferrimagneten können solche Anregungen nicht auftreten. Domänenwände können wie beim Ferromagneten nur in *statischer* Form auftreten, da jede Form von Propagation die Quantenzahl S_{tot}^z verändern würde. Aus diesem Grund kann man erwarten, daß LSWT den Ferrimagneten qualitativ korrekt beschreibt: Quantenfluktuationen führen wie beim zwei- und dreidimensionalen Antiferromagneten zu einer endlichen Untergittermagnetisierung und damit zu einer endlichen *Spinreduktion*.

Es erweist sich als sinnvoll, die Fouriertransformation durch

$$a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ik(n-1/4)} a_k^\dagger \quad \text{und} \quad b_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ik(n+1/4)} b_k^\dagger \quad (2.10)$$

zu definieren. Der dimensionslose Wellenvektor ($2a \rightarrow 1$) durchläuft die Werte $k = 2\pi m/L$, $m = -L/2+1, \dots, L/2$. Der Hamilton-Operator (2.1) wird im Grenzfall $S \rightarrow \infty$

bilinear in den Boseoperatoren und nimmt nach Fouriertransformation die Form

$$H_{\text{LSWT}} = -2gS^2L + 2S \sum_k \left[a_k^\dagger a_k + g b_k^\dagger b_k + \sqrt{g} \cos(k/2) \left(a_k^\dagger b_k^\dagger + a_k b_k \right) \right] \quad (2.11)$$

an. Dieser Hamilton-Operator kann mittels der Bogoljubov-Transformation (siehe z.B. [23])

$$\begin{aligned} \alpha_k^\dagger &= \cosh(\eta_k) a_k^\dagger + \sinh(\eta_k) b_k & \beta_k^\dagger &= \sinh(\eta_k) a_k + \cosh(\eta_k) b_k^\dagger \\ \text{mit } \tanh(2\eta_k) &= \gamma \cos(k/2) & \gamma &= \frac{2\sqrt{g}}{1+g} \end{aligned} \quad (2.12)$$

diagonalisiert werden und führt auf zwei Anregungszeige:

$$H_{\text{LSWT}} = E_0 + 2S \sum_k \left[\omega_k^- \alpha_k^\dagger \alpha_k + \omega_k^+ \beta_k^\dagger \beta_k \right] \quad (2.13)$$

$$E_0 = S \sum_k \left(\sqrt{(1+g)^2 - 4g \cos^2(k/2)} - (1+g) \right) - 2gS^2L \quad (2.14)$$

$$\omega_k^\pm = \frac{1}{2} \left(\sqrt{(1+g)^2 - 4g \cos^2(k/2)} \pm (g-1) \right) \quad (2.15)$$

Die durch α_k^\dagger erzeugte Spinwelle erniedrigt die Magnetisierung des Grundzustands um eine Einheit und wird aus diesem Grund als ferromagnetisches Magnon bezeichnet. Entsprechend erhöht die durch β_k^\dagger erzeugte Spinwelle die Magnetisierung des Grundzustands um eine Einheit und wird als antiferromagnetisches Magnon bezeichnet. Für kleine Werte des Wellenvektors ist die Dispersionsrelation des ferromagnetischen Magnons erwartungsgemäß proportional zu k^2

$$\omega_k^- = \frac{g}{4(g-1)} k^2 + \dots \quad S_{\text{tot}}^z = \frac{L}{2} - 1,$$

die des antiferromagnetischen Magnons weist eine Anregungslücke auf. Damit ergibt sich für die Anregungen dasselbe Szenario wie im ersten Abschnitt (s. (2.5), (2.7)). Die Spinwellensteifigkeit v , welche durch $\omega_k^- = vk^2$ definiert ist, nimmt gemäß (2.5) für $\delta = 1$ den Wert $v = 4/9$ an, wohingegen LSWT den Wert $v = 1/2$, ($g = 2$) liefert. Die Anregungslücke der antiferromagnetischen Anregung beträgt in der Näherung (2.7) $\omega_{af-mag}(k=0)|_{\delta=1} = 11/9$; LSWT führt auf den Wert $\omega_{k=0}^+ = 1$.

Die Energielücke des Ferrimagneten hat ihren Ursprung in einem effektiven Magnetfeld, sowie einem effektiven Staggered-Feld, welches die Spinwelle erfährt.

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \quad S_{\text{tot}}^z = \frac{L}{2} + 1$$

← Spinwelle

Um sich diese Situation der Anregungen im Ferrimagneten zu verdeutlichen, betrachte man einen Spin \tilde{S} Antiferromagneten in einem Magnetfeld B und in einem Staggered-Feld b :

$$\tilde{H} = \sum_{n=1}^N \tilde{S}_n \tilde{S}_{n+1} + B \sum_{n=1}^N S_n^z + b \sum_{n=1}^N (-1)^n S_n^z \quad \tilde{S}_n^2 = \tilde{S}(\tilde{S} + 1) \quad \forall n \quad (2.16)$$

In LSWT ergeben sich zwei Zweige für die Anregungsenergien:

$$\tilde{\omega}_k^\pm = 2\tilde{S} \left(\sqrt{b(b+2) + 1 - \cos^2(k/2)} \pm B \right) \quad (2.17)$$

In diesen Formeln wurde die Länge der magnetischen Einheitszelle $2a$ (a : Gitterkonstante) auf eins fixiert. Für die Wahl

$$\tilde{S} = S\sqrt{g} \quad B^2 = b(b+2) = \frac{(g-1)^2}{4g}$$

ergeben sich genau die Anregungsenergien (2.15) des Ferrimagneten, und die LSWT-Näherung von (2.16) geht in (2.11) über.

Schließlich soll die Ordnung des Grundzustandes in LSWT untersucht werden. Dazu wird zunächst die Untergittermagnetisierung betrachtet, die durch

$$\langle M_A \rangle_{Gz} = \sum_{n=1}^L S_n^z = L - \sum_{n=1}^L \langle a_n^\dagger a_n \rangle_{Gz} = L(1 - \tau) \quad , \quad S = \frac{1}{2}, \quad g = 2 \quad (2.18)$$

definiert ist. Die Größe τ bezeichnet die Spinreduktion, die in beiden Untergittern wegen $S_{tot}^z = \langle M_A \rangle + \langle M_B \rangle = LS(g-1)$ gleich ist. Im thermodynamischen Limes liegen die k -Werte unendlich dicht, und die Spinreduktion kann durch ein elliptisches Integral dargestellt werden:

$$\tau = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk \sinh^2(\eta_k) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{dk}{\sqrt{1 - \gamma^2 \cos^2(k/2)}} \approx 0.305 \quad , \quad g = 2 \quad (2.19)$$

Im Gegensatz zum Antiferromagneten gibt es im Ferrimagneten eine endliche Spinreduktion, was letztlich durch den Faktor $\gamma = 2\sqrt{g}/(1+g) < 1$ für $g > 1$ (s. 2.12) bewirkt wird. Die Untergitterordnung des klassischen Ferrimagneten bleibt also auch im quantenmechanischen Fall korrekt.

Um dieses Ergebnis zu untermauern und die Grundzustandsordnung genauer zu analysieren, sollen nun noch die Korrelationsfunktionen

$$\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle = (1 - \tau)^2 + f(r) \quad , \quad \text{A-Untergitter} \quad (2.20)$$

$$\langle S_n^+ S_{n+r}^- \rangle = \sqrt{f(r)} \quad , \quad \text{A-Untergitter} \quad (2.21)$$

$$f(r) = \frac{1}{L^2} \sum_{k,q} \sinh^2(\eta_k) \cosh^2(\eta_{k+q}) \quad (2.22)$$

berechnet werden. Im thermodynamischen Limes kann die Funktion $f(r)$ unter Ausnutzung von (2.12) durch das Integral

$$\sqrt{f(r)} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^\pi dk \frac{e^{ikr}}{\sqrt{1 - \gamma^2 \cos^2(k/2)}} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^\pi dk \frac{e^{i2kr}}{\sqrt{1 - \gamma^2 \cos^2(k)}} \quad (2.23)$$

dargestellt werden. Mit der Substitution $z = e^{i2kr}$ wird aus diesem Integral das Kurvenintegral

$$\begin{aligned}\sqrt{f(r)} &= -\frac{1}{\pi\gamma} \oint_C \frac{z^{2r} dz}{\sqrt{z^4 + 2z \left(1 - \frac{2}{\gamma^2}\right) + 1}} = -\frac{1}{\pi\gamma} \oint_C \frac{z^{2r} dz}{\sqrt{(z^2 - z_+^2)(z^2 - z_-^2)}} \\ z_{\pm}^2 &= \frac{1}{2\gamma^2} \left(4 - 2\gamma^2 \pm \sqrt{1 - \gamma^2}\right)\end{aligned}\quad (2.24)$$

über den Einheitskreis C in der komplexen Ebene. Die Nullstellen $z_{\pm}^2 = x_{\pm}^2$ liegen sämtlich auf der reellen Achse. Für $g > 1$ liegen die Nullstellen z_+ (z_-) außerhalb (innerhalb) des Einheitskreises. Nun ist es möglich, den Integrationsweg dieses komplexen Integrals vom Einheitskreis auf die reelle Achse schrumpfen zu lassen (*infinitesimaler Einschluß* der Singularitäten), was wiederum auf ein reelles Integral führt:

$$\sqrt{f(r)} = 2 \cdot \frac{1}{\pi\gamma} \int_{-x_-}^{x_-} \frac{x^{2r}}{\sqrt{(x^2 - x_+^2)(x^2 - x_-^2)}} \quad (2.25)$$

Der Grenzfall $r \rightarrow \infty$ ist im wesentlichen durch die beiden Singularitäten $\pm x_-$ bestimmt. Für die Korrelationslängen der asymptotischen Korrelationsfunktionen aus (2.20) und (2.21) ergibt sich:

$$\sqrt{f(r)} \propto e^{-r/\xi_{trans}}, \quad \xi_{trans} = 2\xi_{long}, \quad \xi_{long} = -\frac{1}{2\ln(x_-^2)} \quad (2.26)$$

Für den hier diskutierten Fall $g = 2$ ergibt sich eine sehr kurze Korrelationslänge von $\xi_{long} = 1/(2\ln(2)) \approx 0.72$ in Einheiten der magnetischen Einheitszelle. Für den antiferromagnetischen Grenzfall $g \rightarrow 1$ geht sowohl γ als auch x_- gegen eins, d.h. ξ_{long} und ξ_{trans} divergieren.

2.3 Numerische Resultate

Das physikalische Bild, das bis hierher qualitativ korrekt beschrieben wurde, soll nun mit numerischen Methoden genauer untersucht werden. Es werden Ergebnisse einer von S. Yamamoto [31] durchgeführten Quanten-Monte-Carlo (QMC) Simulation vorgestellt, die mit Dispersionsrelationen und Spektren exakter Diagonalisierung verglichen werden.

Exakte Diagonalisierung bezieht sich hier auf die Berechnung der kleinsten Energieeigenwerte mit dem Lanczos-Algorithmus. Es wurden ausschließlich periodische Randbedingungen verwendet. Die Diagonalisierung wurde in Unterräumen mit festem Wellenvektor k und fester Magnetisierung S_{tot}^z durchgeführt. Es wurden die Systemlängen $L = 4, 8, 10, 12$ Einheitszellen untersucht. Die größten Unterräume (z.B.: $L = 12$, $S_{tot}^z = L/2 - 1 = 5$) setzten sich aus ca. 10 Millionen Basiszuständen zusammen. Die Speicherung dieser Zustände sowie die Matrix-Vektor-Multiplikation wurden parallelisiert, die gesamten Rechnungen auf

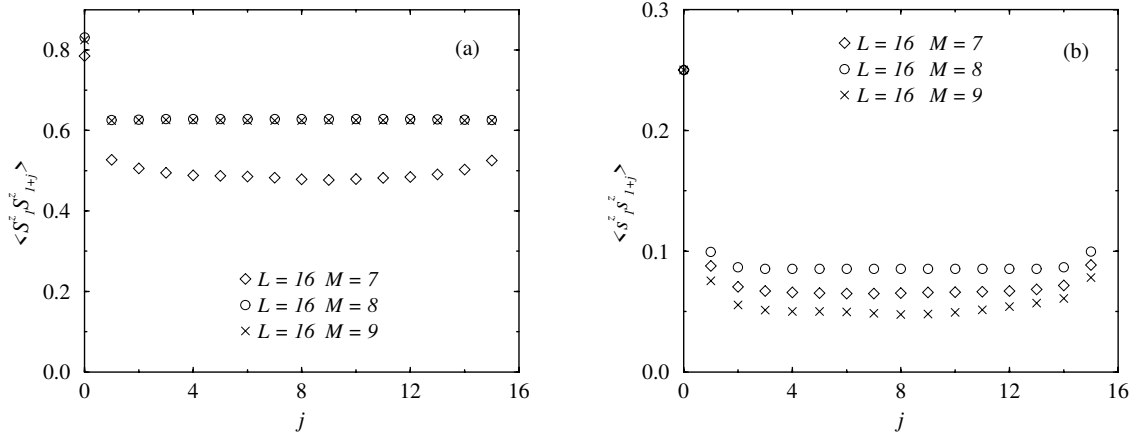


Abbildung 2.2: QMC Korrelationsfunktionen zwischen den $S = 1$ Spins (a) und den $s = 1/2$ Spins (b) in den Unterräumen $S_{tot}^z = M = L/2 - 1, L/2, L/2 + 1$ für 32 Spins.

einer MPP CRAY-T3D 256 SC durchgeführt. Eine ausführliche Beschreibung dieses Algorithmus sowie dessen Implementierung findet man beispielweise in [39].

Darüberhinaus wird eine durch die QMC-Simulation motivierte Störungsentwicklung des Grundzustandes präsentiert.

2.3.1 Resultate einer Quanten-Monte-Carlo-Simulation

Die Berechnung der Grundzustandsenergie bei festem S_{tot}^z durch eine QMC-Simulation wird durch Vorwahl einer hinreichend kleinen Temperatur möglich. Es ist jedoch zu bedenken, daß eine Erniedrigung der Temperatur eine größere Anzahl von QMC-Schritten, d.h. mehr Rechenaufwand erfordert. Bei einer Temperatur von $k_B T/J = 0.02$ findet man einen Finite-Size-extrapolierten Wert von $E_{Gz}(L/2) = -1.455 \pm 0.001$.

Die Anregungslücke des antiferromagnetischen Zweigs folgt aus der Differenz $\Delta = E_{(Gz)}(L/2 + 1) - E_{(Gz)}(L/2) = 1.767 \pm 0.003$, wobei es sich auch hier um einen extrapolierten Wert handelt. Der große Wert dieser Anregungslücke unterscheidet sich deutlich von dem des LSWT-Resultats.

Für die Korrelationslängen ergibt sich ein der LSWT sehr ähnliches Bild. In Abb. (2.2) sind die longitudinalen Korrelationsfunktionen zwischen den $S = 1$ Spins und den $s = 1/2$ Spins dargestellt. Die Korrelationsfunktionen zerfallen innerhalb weniger Gitterplätze auf den asymptotischen Wert $(\langle S_n^z \rangle)^2$ bzw. $(\langle s_n^z \rangle)^2$. Dies bestätigt die Vorhersage der LSWT, d.h. eine Korrelationslänge, die kleiner als die Einheitszelle ist. Aufgrund dieses starken Zerfalls ist es nicht möglich, die asymptotischen Korrelationen aus den Daten in Abbildung (2.2) zu berechnen. Jedoch kann man aus Abb. (2.2) eine Spinreduktion von $\tau \approx 0.21$ ablesen, was deutlich geringer als das LSWT-Resultat in (2.19) ist. An dieser Stelle zeigt sich, daß LSWT ungeeignet ist, wenn es darum geht, quantitative Aussagen zu machen.

Dies ist jedoch keineswegs überraschend, wenn man sich den Gültigkeitsbereich ($S \rightarrow \infty$) der LSWT vor Augen führt.

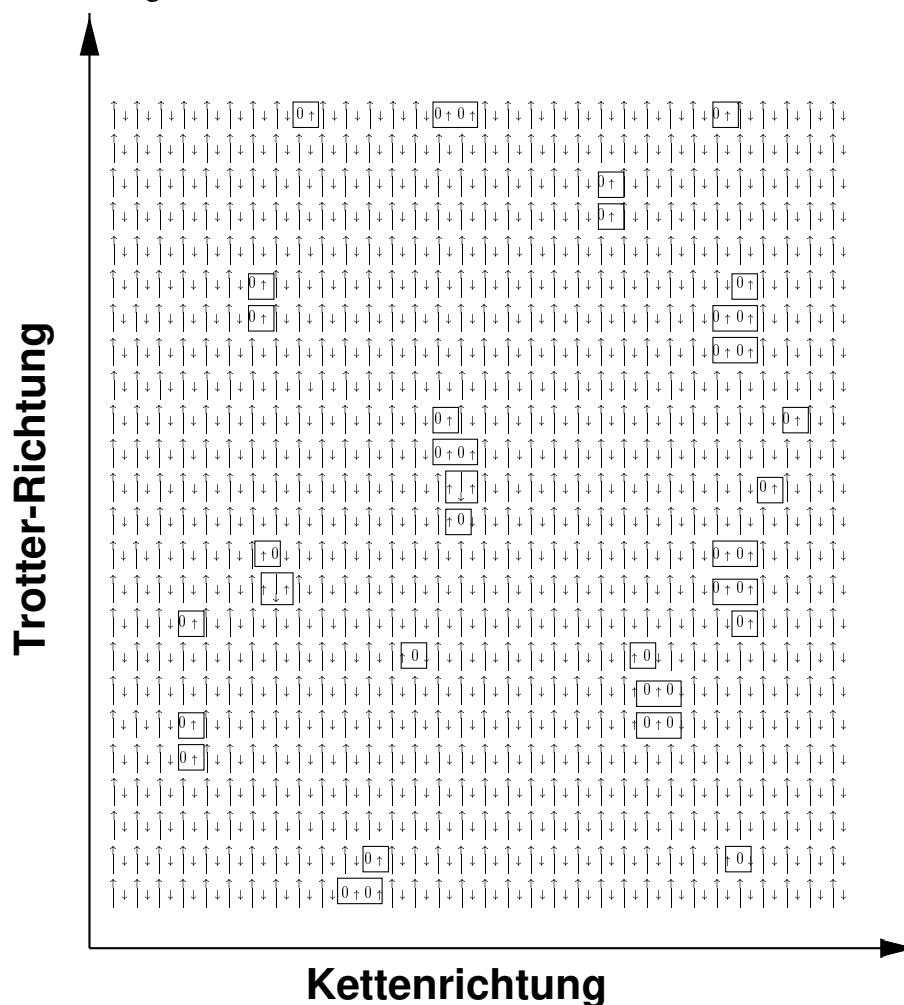


Abbildung 2.3: Quantenfluktuationen in einem Snapshot bei einer Temperatur von $k_B T / J = 0.02$

Als anschauliches Nebenprodukt erhält man bei einer QMC-Simulation einen sogenannten *Snapshot*. Die Abszisse eines solchen Snapshots stellt die räumlich Richtung des Spinsystems dar, die Ordinate die imaginäre Zeit oder auch Trotter-Richtung. Jeder diskrete Zeitschritt stellt eine Spinkonfiguration mit "relevantem Gewicht" bei einer vorgegebenen Temperatur dar. Wählt man die Temperatur nun hinreichend klein (was vom Spektrum des Modells abhängt), so kann man den durch Quantenfluktuationen *verunreinigten* Grundzustand anschaulich darstellen (vgl Abb.: (2.3)). Betrachtet man den Snapshot etwas genauer, so stellt man fest, daß im wesentlichen folgende Typen von Quantenfluktuationen auftreten:

$$\text{2-Platz-Fluktuationen} : \quad \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow 0 \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \quad (2.27)$$

$$\text{3-Platz-Fluktuationen} : \quad \dots \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \quad (2.28)$$

$$\text{4-Platz-Fluktuationen : } \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow 0 \uparrow 0 \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \quad (2.29)$$

2.3.1.1 Störungsrechnung

Die Quantenfluktuationen (2.27),(2.28) und (2.29), die auf wenige Einheitszellen beschränkt sind, treten in störungstheoretischen Rechnungen niedriger Ordnung auf.

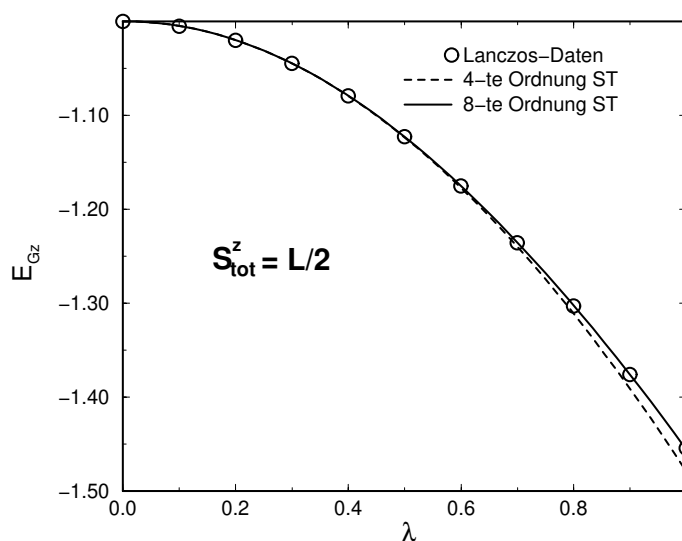


Abbildung 2.4: Lanczos-Daten für 16 Spins im Vergleich zur Störungsreihe.

Das Ising-Modell stellt den ungestörten Operator dar, der transversale Anteil die Störung:

$$S_n^z s_m^z + \frac{1}{2} (S_n^+ s_m^- + S_n^- s_m^+) \rightarrow S_n^z s_m^z + \lambda \frac{1}{2} (S_n^+ s_m^- + S_n^- s_m^+) \quad , \quad 0 \leq \lambda \leq 1 \quad (2.30)$$

Die Energien werden als Potenzreihen des Störparameters λ berechnet. Auf Durchführung und Implementation der stationären Störungstheorie wird ausführlich im nächsten Kapitel eingegangen. Beginnt man mit dem vollständig geordneten Zustand $\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots$ so ergibt sich

$$\frac{E_{Gz}}{L} = -1 - \frac{1}{2}\lambda^2 + \frac{1}{48}\lambda^4 + 0.05136\lambda^6 - 0.02809\lambda^8 + \mathcal{O}(\lambda^{10}) \quad (2.31)$$

als Reihenentwicklung für den Grundzustand. In Abb. (2.4) wird die Energie dieser Entwicklung mit Lanczos-Daten verglichen. Dabei wurden die Lanczos-Daten nicht mehr extrapoliert (zum thermodynamischen Limes), da sie mit den extrapolierten Werten schon bis auf drei Nachkommastellen übereinstimmen (vgl. Abb. (2.5)). Die Grundzustandsenergie der Reihenentwicklung in 8-ter Ordnung liegt 0.1% unter dem Lanczos-Resultat (2.33).

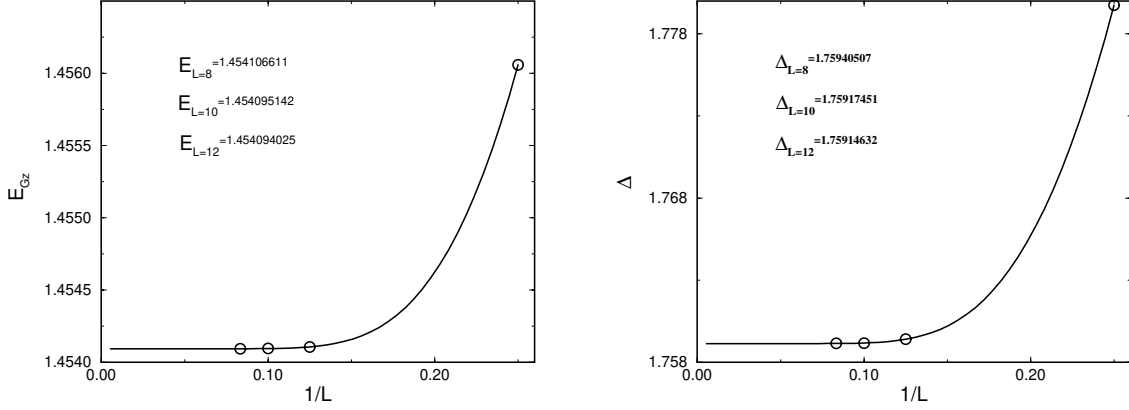


Abbildung 2.5: Finite-Size-Extrapolation von Lanczos-Daten für die Längen $L = 4, 8, 10, 12$. Links für den Grundzustand mit $S_{tot}^z = L/2$, rechts für die Anregungslücke $\Delta = E(S_{tot}^z = L/2 + 1) - E(S_{tot}^z = L/2)$

2.3.2 Exakte Diagonalisierung

Im Gegensatz zur QMC-Simulation ist exakte Diagonalisierung eine temperaturunabhängige Methode zur Berechnung niederenergetischer Spektren endlicher Systeme. Die Finite-Size-Extrapolation des Ferrimagneten mit den oben erwähnten Systemgrößen $L = 4, 8, 10, 12$ Einheitszellen ist absolut unproblematisch wegen der kleinen Korrelationslänge des Systems. Die Lanczos-Daten für den Grundzustand mit $S_{tot}^z = L/2$ und für die Anregungslücke des antiferromagnetischen Magnons Δ wurden gemäß

$$f(L) = f(\infty) + ae^{-bL} \frac{1}{L} \quad (2.32)$$

extrapoliert. Die Fit-Parameter a, b wiesen beim Anpassen einen typischen quadratischen Fehler von ca. 10^{-10} auf. Für die extrapolierten Werte erhält man eine gute Übereinstimmung mit den QMC-Daten, die bei einer kleinen aber endlichen Temperatur berechnet wurden.

$$E_{(Gz)} = -1.454093 \quad (L = \infty) \quad a = 0.619926, \quad b = 1.0901 \quad (2.33)$$

$$\Delta = 1.759142 \quad (L = \infty) \quad a = 3.267051, \quad b = 0.9201 \quad (2.34)$$

Der Parameter $1/b$ hat die Dimension und Größenordnung der Korrelationslänge. Der hier gefundene Wert $1/b = 0.91734$ zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem LSWT-Resultat. Gemäß Abb. (2.5) stimmen die Grundzustandsenergien der endlichen System $L = 8, 10, 12$ bereits drei Nachkommastellen mit dem extrapolierten Wert überein. Diese Tatsache soll bei der Darstellung der Dispersionsrelationen ausgenutzt werden: Bei einer Länge von $L = 10$ ergeben sich 5 verschiedene Werte für den Wellenvektor k . Für $L = 12$ erhält

man 6 verschiedene Werte, die sich jedoch von denen des 10-er Systems unterscheiden. In dem man alle k -Werte in einer Abbildung darstellt, gewinnt man eine bessere Vorstellung der Dispersion im thermodynamischen Limes. In Abb. (2.6) sind Dispersionsrelationen für das ferro-/antiferromagnetische Magnon im Vergleich zu den Spinwellenresultaten dargestellt. Die Bandbreiten beider Dispersionen werden durch LSWT gut wiedergegeben. Für die

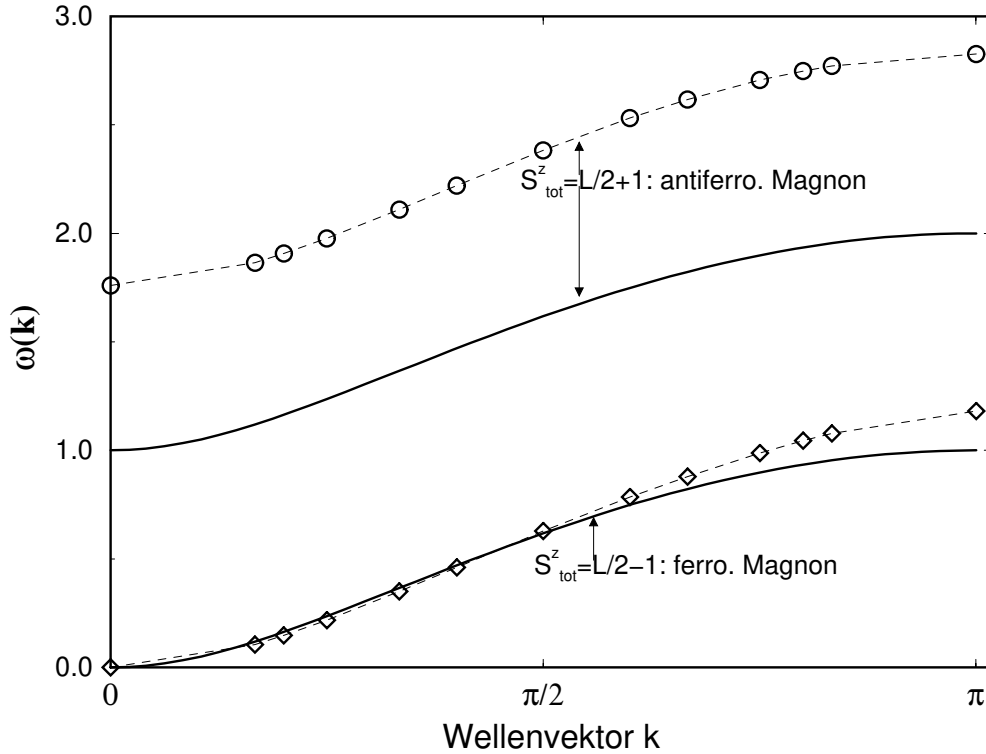


Abbildung 2.6: Dispersionsrelationen für das ferro-/antiferromagnetische Magnon. Die Kreise (Diamanten) sind Lanczos-Daten; Durchgezogene Linien sind LSWT-Dispesionen. Die gestrichelten Linien dienen als Orientierungshilfen.

Spinwellensteifigkeit v ergibt sich aus den niederenergetischen Niveaus ($k = 0, \pi/6, \pi/5$) $v \approx 0.37$ im Gegensatz zu dem LSWT-Wert $v_{\text{LSWT}} = 1/2$ und dem störungstheoretischem Ergebnis $v_{\text{ST}} = 2/9$. Die exakten Daten der antiferromagnetischen Anregung scheinen gegenüber der LSWT-Kurve um einen gewissen Betrag nach oben verschoben. Gemäß (2.17) könnte man diese Verschiebung durch ein größeres effektives Magnetfeld, welches das antiferromagnetische Magnon im Quanten-Ferrimagneten (2.1) erfährt, erklären.

2.3.2.1 Gebundene Zustände im Unterraum $S_{\text{tot}}^z = L/2 - 2$

Um die Analogie des Ferrimagneten zum Ferromagneten bei niedrigen Temperaturen weiter zu untermauern, soll das Spektrum für $S_{\text{tot}}^z = L/2 - 2$ auf gebundene Zustände untersucht werden. Tatsächlich treten im Spektrum dieses Unterraums Energieniveaus auf, die

sich nicht auf Kontinuumszustände beziehen lassen. In Abb. (2.7) sind die niedrigsten Energieniveaus für $L = 8, 10$ getrennt nach Kontinuumszuständen und gebundenen Zuständen aufgetragen. Die Eigenschaft eines Niveaus, einem gebundenen oder Kontinuumszustand

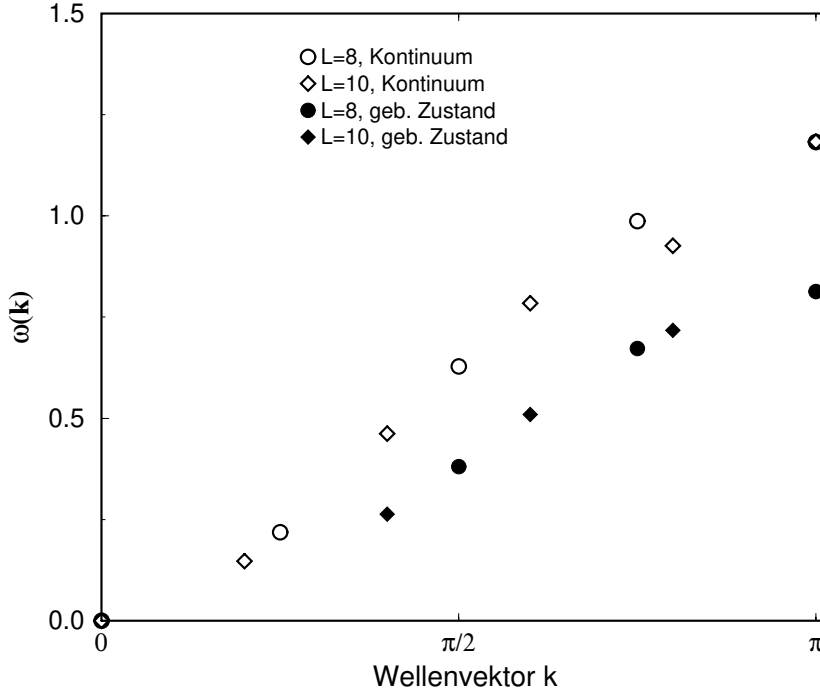


Abbildung 2.7: Gebundene und Kontinuumszustände für $L = 8, 10$ im Unterraum $S_{tot}^z = L/2 - 2$

zugehörig zu sein, wurde aus den Daten des niedrigliegenden Spektrums für $S_{tot}^z = L/2 - 1$ berechnet. Dies soll am Beispiel $L = 8$, $k = \pi$ demonstriert werden: In dem Unterraum $S_{tot}^z = L/2 - 2$, $k = \pi$ ergibt sich für die beiden niedrigsten Eigenwerte

$$\Delta_1 = 0.8131 \quad \Delta_2 = 1.1823 . \quad (2.35)$$

Für $L = 8$ gibt es folgende 2-Magnon Kontinuumszustände (q_1, q_2) mit Schwerpunktsimpuls $k = \pi$: $(0, \pi)$, $(\pi/4, 3\pi/4)$, $(\pi/2, \pi/2)$. Die zugehörigen Energien $\omega(q_1, q_2) = \omega(q_1) + \omega(q_2) + \mathcal{O}(1/L)$ ergeben sich aus den Daten des Spektrums mit $S_{tot}^z = L/2 - 1$:

$$\omega(0, \pi) = 1.1816 \quad \omega(\pi/4, 3\pi/4) = 1.2055 \quad \omega(\pi/2, \pi/2) = 1.2571$$

Ein Vergleich dieser Energien mit (2.35) zeigt, daß $\Delta_2 = 1.1823$ der Kontinuumszustand mit den Einteilchenimpulsen $(q_1, q_2) = (0, \pi)$ ist. Der geringe Unterschied der beiden Zahlenwerte Δ_2 und $\omega(0, \pi)$ ist auf Wechselwirkungseffekte der Ordnung $\mathcal{O}(1/L)$ zurückzuführen.

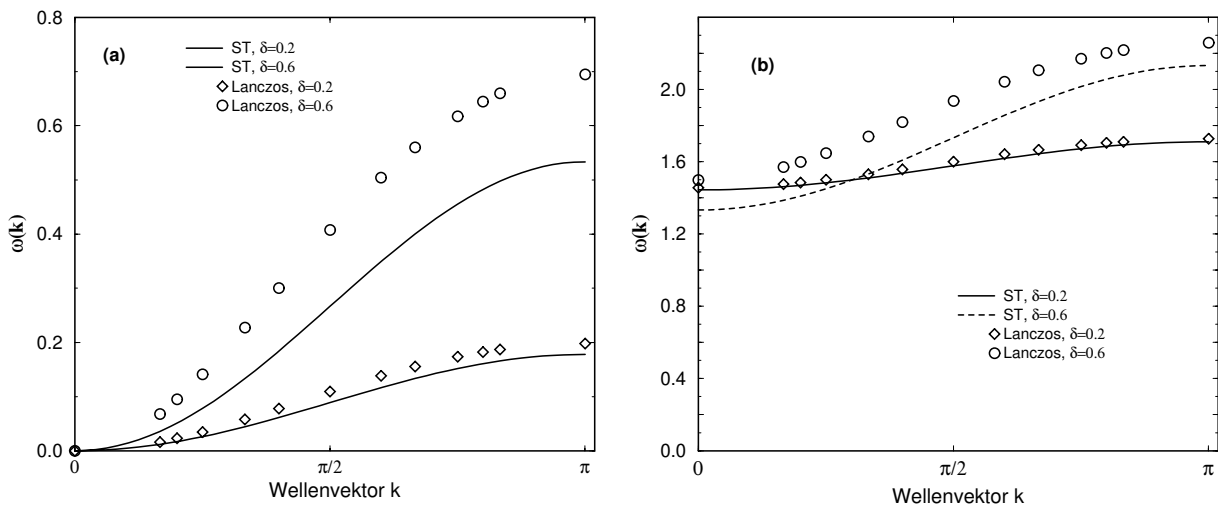


Abbildung 2.8: Lanczos-Daten des alternierenden Ferrimagneten im Vergleich zur Störungstheorie erster Ordnung für: a.) ferro-Magnon ,b.) antiferro-Magnon.

2.3.2.2 Alternierende Wechselwirkung

Abschließend soll das im ersten Abschnitt dieses Kapitels vermittelte Bild des alternierenden Ferrimagneten numerisch verifiziert werden. Dazu sind in Abb. (2.8) numerische Daten für das ferro-/antiferromagnetische Magnon mit den störungstheoretischen Ausdrücken (2.5) und (2.7) verglichen worden. Die Übereinstimmung für $\delta = 0.2$ ist sehr gut, für $\delta = 0.6$ sind höhere Ordnungen notwendig, um eine bessere Übereinstimmung zu erzielen. Tatsache ist jedoch, daß sich der Ferrimagnet für das gesamte Intervall $0 < \delta \leq 1$ bei hinreichend niedrigen Temperaturen wie ein Ferromagnet verhält.

KAPITEL 3

Der Heisenberg-Ising-Antiferromagnet

Der anisotrope Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{n=1}^N \left[S_n^z S_{n+1}^z + \frac{\lambda}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right] \quad , \quad \vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1 \quad (3.1)$$

mit $J > 0$ und $0 \leq \lambda < 1$ wird als Heisenberg-Ising-Antiferromagnet oder auch xxz-Modell bezeichnet. Die Operatoren S_n^α , $\alpha = +, -, z$ sind Spin $S = 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ Drehimpulsoperatoren. Energieeigenwerte werden in Einheiten des Austauschintegrals J , Längen in Einheiten der Gitterkonstante a angegeben. Aufgrund der Anisotropie ($\lambda \neq 1$) vertauscht (3.1) nicht mit dem Operator $(\vec{S}_{tot})^2$. Der Magnetisierungsoperator \hat{S}_{tot}^z und der Translationsoperator vertauschen mit (3.1). Im Limes $S \rightarrow \infty$, $0 \leq \lambda < 1$ kann (3.1) durch lineare Spinwellentheorie (LSWT) beschrieben werden. Die LSWT-Ergebnisse für (3.1) sollen hier noch einmal zusammengefaßt werden:

$$H_{LSWT} = E_0 + 2JS \sum_k \omega_k \left[\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k \right] \quad (S \rightarrow \infty) \quad (3.2)$$

$$E_{Gz} = -JNS(1+S) + 2JS \sum_k \omega_k \quad (3.3)$$

$$\omega_k = \sqrt{1 - \lambda^2 \cos^2(k)} \quad (3.4)$$

Die durch die Boseoperatoren $\alpha_k^\dagger, \beta_k^\dagger$ erzeugten Spinwellen besitzen dieselbe Anregungsenergie ω_k und unterscheiden sich durch den Wert der Magnetisierung $S_{tot}^z = 1$ beziehungsweise $S_{tot}^z = -1$. Die Spinreduktion $\tau(\lambda)$ ist durch die Untergittermagnetisierung, die der Ordnungsparameter der Néel-Phase ist, des Untergitters A bzw. B definiert,

$$\langle M_{A/B} \rangle_{Gz} = \sum_{n \in A/B} S_n^z = \pm \frac{N}{2} (S - \tau(\lambda)) \quad (3.5)$$

$$\tau(\lambda) = -\frac{1}{2} + \frac{\pi}{2} \int_0^\pi \frac{dk}{\sqrt{1 - \lambda^2 \cos^2(k)}} \quad (3.6)$$

Mit wachsender Stärke des transversalen Teils von (3.1) enthalten die Néel-Zustände

$$|Néel_1\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad \text{und} \quad |Néel_2\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \quad (3.7)$$

zunehmend Quantenfluktuation, was sich in einer anwachsenden Spinreduktion widerspiegelt. Die LSWT-Grundzustände sind im Intervall $0 \leq \lambda < 1$ langreichweitig geordnet. Im

Grenzfall $\lambda \rightarrow 1$ wird die volle Rotationssymmetrie des Hamilton-Operators wiederhergestellt. Die Anisotropie-Energielücke $\omega_{k=0}(\lambda)$ in (3.4) schließt sich in diesem Grenzfall, während die Spinreduktion als Folge der Näherung divergiert. Diese Divergenz deutet auf einen Quanten-Phasenübergang am isotropen Punkt $\lambda = 1$ hin. Ein solcher Phasenübergang ist durch das Verschwinden des Ordnungsparameters (3.5) charakterisiert und wird durch das Verschwinden der Energielücke einer sogenannten *Soft-Mode* hervorgerufen. Diese Anregungen kondensieren im Grundzustand, d.h. es findet eine Neuformierung des Grundzustands statt.

Für den $S = 1/2$ Heisenberg-Ising-Antiferromagneten konnte ein solcher Phasenübergang als Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang von der Néel-Phase in die sogenannte Heisenberg-Phase am isotropen Punkt $\lambda = 1$ identifiziert und berechnet werden [11], [12]. Tatsächlich nimmt das $S = 1/2$ xxz-Modell eine besondere Stellung ein, da es für alle Werte von λ integrabel ist. Im Zusammenhang mit dem Sechs-Vertex-Modell konnten J. D. Johnson, S. Krinsky und B. M. McCoy [6] die niedrigliegenden Anregungen von (3.1) mit Bethe-Ansatz-Methoden berechnen und im $S_{tot}^z = \pm 1$ Unterraum als zweiparametrische Dispersionsrelation charakterisieren:

$$\Delta E(q_1, q_2) = \epsilon(q_1) + \epsilon(q_2) \quad , \quad 0 \leq q_1, q_2 \leq \pi \quad (3.8)$$

$$\epsilon(q) = \sqrt{1 - \lambda^2} \frac{K(k)}{\pi} \sqrt{1 - k^2 \cos^2(q)} \quad (3.9)$$

$$K(k) = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad \text{mit} \quad K'(k) = K(k') \quad , \quad k' = \sqrt{1-k^2}$$

Das vollständige elliptische Integral $K(k)$ liefert den Zusammenhang zwischen der Anisotropie λ und dem Modul k :

$$\frac{1}{\lambda} = \cosh \left(\pi \frac{K'}{K}(k) \right) \quad (3.10)$$

Der Grenzfall starker Anisotropie $\lambda \ll 1$ wurde von J. Villain [7] sowie von N. Ishimura und H. Shiba [8] in erster Ordnung entarteter Störungstheorie in λ beschrieben. Das Auftreten einer Entartung spiegelt hier die Tatsache wider, daß das niederenergetische Spektrum des $S = 1/2$ xxz-Modells im Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ aus zwei elementaren Anregungen - *Domänenwänden* - besteht. Abbildung (3.1) illustriert den Zusammenhang zwischen einer 2-Domänenwandkonfiguration und einer lokalen Spinabweichung im Ising-Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$. Für diesen Grenzfall, der den Ausgangspunkt der Störungstheorie in [8] bildet, sind die Zustände in Abbildung (3.1) für alle Entfernungen r der beiden Domänenwände entartet. Entwickelt man nun die Dispersionsrelation (3.8) nach λ (vgl. Anhang A), so ergibt sich in niedrigster Ordnung das Resultat von N. Ishimura und H. Shiba. Damit lassen sich die elementaren Anregungen aus (3.8) als magnetische Domänenwände charakterisieren, die insbesondere am isotropen Punkt $\lambda = 1$ zu den von L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan eingeführten *Spinonen* werden [5].

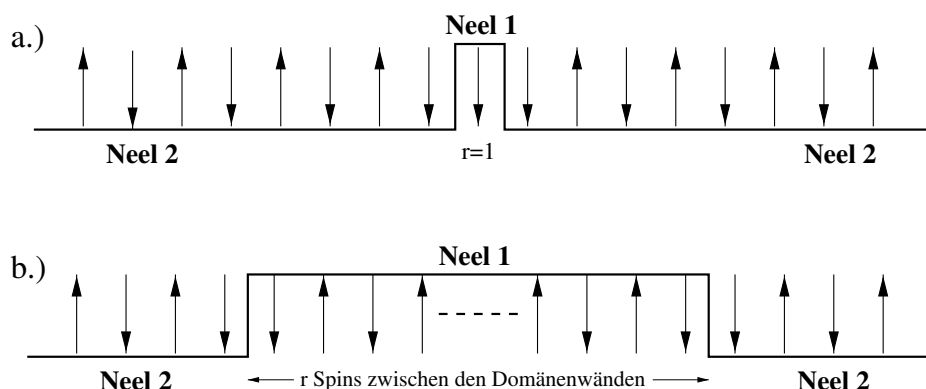


Abbildung 3.1: Eine lokale Spinabweichung (a) setzt sich aus zwei Domänenwänden (b) zusammen

Diese oft auch als *Soliton* oder *Kink* bezeichneten Anregungen treten in Ketten mit gerader Anzahl von Gitterplätzen (d.h. N gerade) und periodischen Randbedingungen nur als Paare auf. Eine einzelne Domänenwand kann in Ketten mit ungeradem N und periodischen Randbedingungen realisiert werden und besitzt die Magnetisierung $S_{tot}^z = 1/2$. Am isotropen Punkt wird diese Domänenwand zu einem Spinon, das insbesondere durch $S_{tot} = 1/2$ charakterisiert ist. Das niederenergetische Anregungsspektrum von $S = 1/2$ Ketten mit gerader Anzahl von Gitterplätzen ist durch ein 2-Teilchen-Kontinuum gegeben, welches für verschiedene Werte der Anisotropie in Abbildung (3.2) dargestellt ist: Auf der Ordinate ist die Anregungsenergie für verschiedene Werte des Relativimpulses $q = (q_1 - q_2)/2$, auf der Abszisse der Schwerpunktsimpuls $k = q_1 + q_2$ aufgetragen. (Fixiert man den Relativimpuls $q = q_0$, so ist der Schwerpunktsimpuls wegen $0 \leq q_1, q_2 \leq \pi$ auf das Intervall $2q_0 \leq k \leq 2(\pi - q_0)$ beschränkt). Deutlich zu erkennen ist das Anwachsen der Energielücke und die Verkleinerung der Bandbreite für $\lambda \rightarrow 0$. Im Grenzfall $\lambda = 0$ wird (3.1) ein Ising-Modell, d.h. die durch den transversalen Teil des Hamilton-Operators hervorgerufene Dynamik verschwindet. Als Folge davon kollabiert das Kontinuum in Abbildung (3.2) zur Linie $\Delta E = 1$.

Die Frage nach den elementaren Anregungen im $S = 1$ Heisenberg-Ising-Antiferromagnet war von großer Bedeutung, nachdem F. D. M. Haldane 1983 die Hypothese aufstellte, daß das eindimensionale isotrope antiferromagnetische Heisenberg-Modell mit ganzzahligem Spin eine Anregungslücke und exponentiell zerfallende räumliche Korrelation aufweist [10]. Haldane's Vermutung basiert auf einer Abbildung des Spin- S -Antiferromagneten auf ein nichtlineares Sigma-Modell. Im Rahmen dieser Abbildung entwickeln Systeme mit ganzzahligem Spin eine *dynamisch erzeugte Masse* $\Delta \propto e^{-\pi S}$. Der Begriff dynamisch erzeugte Masse ist folgendermaßen zu verstehen: Mit zunehmender Stärke der Quantenfluktuationen wird aus dem langreichweitig geordneten Néel-Zustand ein ungeordneter Grundzustand, d.h. ein Zustand mit exponentiell zerfallenden Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, mit der Korrelationslänge $\xi \propto e^{\pi S}$. Zustände, wie sie zum Beweis des Lieb-Schulz-Mattis-Theorem

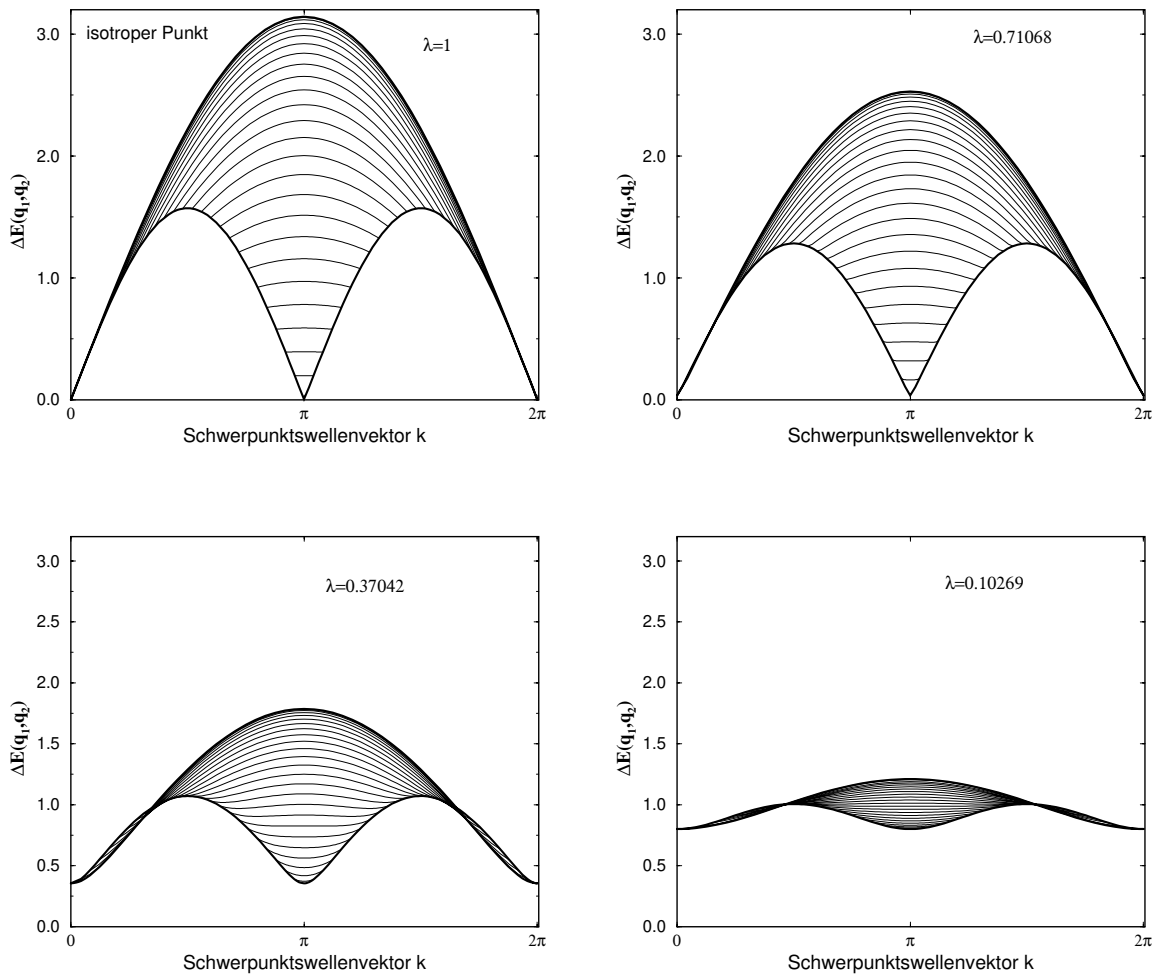


Abbildung 3.2: Das 2-Domänenwandkontinuum für verschiedene Anisotropien λ .

konstruiert wurden [9], sind im ungeordneten Grundzustand enthalten, d.h. haben nichtverschwindende Matrixelemente mit dem Grundzustand. Die elementaren Anregungen über dem ungeordneten Grundzustand sind von Haldane als Triplet (Haldane-Triplett) charakterisiert worden. Die Tripletanregung des $S = 1$ Antiferromagneten wurde sowohl numerisch als auch mit analytischen Methoden untersucht. Der Wert für die Anregungslücke dieses Triplets beträgt $\Delta_{S=1} \approx 0.41J$, die Korrelationslänge $\xi_{S=1}$ des Grundzustands ist ca. 6 Gitterplätze lang [40], [41], [42], [43], [44], [45], [46], [47].

Ein weiterer von Haldane vorhergesagter Unterschied zwischen antiferromagnetischen Ketten mit halbzahligem/ganzzahligem Spin ist das Auftreten eines Quanten-Phasenübergangs bei endlicher Anisotropie $0 < \lambda_c < 1$ für Ketten mit ganzzahligem Spin [10]. Haldane vermutete, daß die kritischen Exponenten dieses Quanten-Phasenübergangs denen des zweidimensionalen Ising-Modells entsprechen. Das Heisenberg-Ising-Modell mit $S = 1$ weist - im

Gegensatz zu dem mit $S = 1/2$ - einen solchen Quanten-Phasenübergang zweiter Ordnung bei $\lambda_c \approx 0.84$ auf [48], [49], [24]. Für $\lambda < \lambda_c$ besitzt die $S = 1$ Kette einen Néel-geordneten Grundzustand, der sich durch Kondensation von sogenannten *Spin-Zero-Defekten* (SZD) am Phasenübergangspunkt λ_c zu einem ungeordneten Grundzustand entwickelt. Ein SZD am Gitterplatz n ist als Nullprojektion von S_n^z zwischen zwei unterschiedlich orientierten Spins ($\dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow 0 \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots$ oder $\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow 0 \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots$) definiert. Die elementare Bedeutung von SZD's als Soft-Moden wurde von G. Gómez-Santoz [48] und H.-J. Mikeska [50] durch ein effektives Fermionenmodell analysiert. Der Grundzustand in der sogenannten Haldane-Phase $\lambda > \lambda_c$ wird auch als Spinflüssigkeit bezeichnet und kann durch eine sogenannte verborgene Ordnung

$$\dots \uparrow\downarrow\uparrow 0 0 \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow 0 \downarrow 0 \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow 0 0 0 0 0 \uparrow\downarrow \dots \quad (S = 1) \quad (3.11)$$

charakterisiert werden. Streicht man in (3.11) die Nullprojektionen heraus, so bleibt ein antiferromagnetisch geordneter Zustand übrig. Im isotropen $S = 1$ Antiferromagneten ist diese Ordnung nicht vollständig ausgebildet. Der zur verborgenen Ordnung (3.11) gehörige nichtlokale Ordnungsparameter

$$T^{z,z}(n) = \langle S_i^z \exp \left(i\pi \sum_{j=i+1}^{i+n} S_j^z \right) S_{i+n}^z \rangle . \quad (3.12)$$

wurde von M. Den Nijs und K. Rommelse [51] eingeführt und als *String-Order-Parameter* bezeichnet.

T. Kennedy und H. Tasaki stellten eine nichtlokale unitäre Transformation auf, die (3.12) in eine lokale Größe transformiert [52]. Die verborgene Ordnung (3.11) transformiert sich in gewöhnliche ferromagnetische Ordnung. Die Transformation erhält die Symmetrien des Hamilton-Operators, der nach der Transformation die Symmetrie der Drehung um jede Koordinatenachse im Spinraum um den Winkel π besitzt. Diese drei Rotationen erzeugen eine diskrete $Z_2 \times Z_2$ Symmetrie. Nach Kennedy und Tasaki lassen sich die verschiedenen Phasen der $S = 1$ Kette mit offenen Randbedingungen durch diese diskrete Symmetrie charakterisieren. In der Néel-Phase ist der Grundzustand zweifach entartet und bricht somit die Symmetrie der Drehungen um die x -Achse. In der Haldane-Phase dagegen herrscht eine vierfache Grundzustandsentartung im thermodynamischen Limes, d.h. die $Z_2 \times Z_2$ Symmetrie ist vollständig gebrochen. Der Verlauf von $T^{\alpha,\alpha}(n)$, $\alpha = x, y, z$ in der Haldane-Phase wird in [53] diskutiert. I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki (AKLT) gelang es 1988 einen $S = 1$ Antiferromagneten mit exaktem Grundzustand, der perfekte verborgene Ordnung aufweist, zu konstruieren [13]. Der Hamilton-Operator dieses *Valence-Bond-Solid* (VBS) ist eine Summe von lokalen Projektoren:

$$H_{AKLT} = \sum_{n=1}^N \left[\vec{S}_n \vec{S}_{n+1} + \frac{1}{3} \left(\vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \right)^2 + \frac{2}{3} \right] . \quad (3.13)$$

Eine Diskussion des AKLT-Modells (3.13) in Verbindung mit Spinleitern ist Thema des nächsten Kapitels. In diesem Zusammenhang wird auf das Haldane-Triplett, welches mit der elementaren Anregung der Spinleiter eng verknüpft ist, eingegangen.

Die Untersuchungen von Heisenberg-Ising-Modellen mit $S > 1$ beschränken sich aufgrund der großen Zahl von Freiheitsgraden dieser Modelle im wesentlichen auf numerische Methoden. Dabei sind hohe Anforderungen an diese Methoden zu stellen, da die benötigten Systemgrößen N mit wachsendem S ebenfalls anwachsen. Beispielsweise beträgt die Korrelationslänge des $S = 2$ Heisenberg-Antiferromagneten $\xi_{S=2} \approx 49$. Eine Korrelationslänge dieser Größe erfordert Systemlängen von bis zu $N \approx 300$ zur korrekten Finite-Size-Extrapolation der Daten [54], [55]. Der $S = 2$ Antiferromagnet konnte mit Quanten-Monte-Carlo-Simulationen (QMC) und Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Rechnungen (DMRG) untersucht werden. Für die Anregungslücke des Haldane-Tripletts wurde der Wert $\Delta_{S=2} \approx 0.085$ berechnet [54]. Die Absenkung der Energielücke $\Delta_{S=2}$ gegenüber $\Delta_{S=1}$ einerseits sowie die Verschiebung von $\lambda_{c,S=2}$ in Richtung des isotropen Punktes gegenüber $\lambda_{c,S=1}$ andererseits bestätigen Haldane's Sigma-Modell-Analyse: Im Grenzfall $S \rightarrow \infty$ verschwindet die Anregungslücke, die Korrelationslänge divergiert und $\lambda_c \rightarrow 1$.

Ebenfalls mit DMRG konnte das kritische Verhalten des isotropen $S = 3/2$ Antiferromagneten bestimmt werden [56]. Der durch

$$\langle S_0^z S_r^z \rangle \propto \frac{\sqrt{\ln(Br)}}{r^\eta} \quad (3.14)$$

definierte Exponent η nimmt wie bei der $S = 1/2$ Kette den Wert $\eta = 1$ an. Dispersionsrelationen elementarer Anregungen für isotrope $S = 3/2, 2$ Antiferromagneten wurden mit QMC durch Auswertung der Korrelationsfunktionen in Trotter-Richtung berechnet [57].

Gegenstand dieses Kapitels ist die Untersuchung des Grundzustands sowie elementarer Anregungen von (3.1) mit der Methode der stationären Störungstheorie in λ . Im ersten Abschnitt werden verschiedene Formen der stationären Störungstheorie präsentiert und die Möglichkeit der Computer-Implementation diskutiert. Eine Beschreibung des Algorithmus zur rekursiven Formulierung der Störungstheorie befindet sich in Anhang B. Anschließend werden Methoden zur Extrapolation singulärer Potenzreihen erläutert. Die Grundzustandserwartungswerte der Energie, der Untergittermagnetisierung und des statischen Strukturfaktors werden im dritten Abschnitt untersucht. Ausgangspunkt des vierten Abschnitts ist die Klassifikation der niederenergetischen Anregungen im Ising-Grenzfall. Es werden Störungsreihen verschiedener Anregungstypen im Hinblick auf die Quanten-Phasenübergänge Néel-Phase \rightarrow Heisenberg-Phase in Systemen mit halbzahligem Spin und Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase in Systemen mit ganzzahligem Spin analysiert.

3.1 Störungstheorie für eindimensionale Spinsysteme

Es werden zwei Typen nicht entarteter, stationärer Störungstheorie vorgestellt: Einerseits Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie (RSST), andererseits rekursive Störungstheorie (RST) [58]. Ziel ist es, einen effektiven Computeralgorithmus für die Störungstheorie zu entwickeln, der es ermöglicht, Potenzreihen für den Grundzustand, Anregungen und Erwartungswerte bis zu hohen Ordnungen zu berechnen. Ausgangspunkt der Störungstheorien ist

die Aufspaltung von (3.1) in einen ungestörten Operator (Ising-Anteil) und einen Störoperator (transversaler Anteil):

$$H_{xxz} = H_I + \lambda H_T \quad (3.15)$$

Die Zustände werden durch die S^z -Projektionen der Spins dargestellt und sind Eigenvektoren des Ising-Modells: $H_I|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle$. Die Energieeigenwerte werden als Potenzreihen in λ entwickelt. Für ein beliebiges Energieniveau j gilt die stationäre Schrödinger-Gleichung:

$$H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle \quad (3.16)$$

$$E_j = \sum_{\mu=0}^{\infty} \lambda^\mu e_\mu^{(j)} \quad (3.17)$$

3.1.1 Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie

Zunächst zur RSST (Die Herleitung der RSST-Formeln findet man in Standardlehrbüchern wie z.B. [59]): Die Zustände $|\psi_j\rangle$ werden in der Basis $\{|i\rangle\}$ entwickelt, wobei der ungestörte Zustand $|j\rangle$ nicht entartet sein soll:

$$|\psi_j\rangle = \sum_i c_i^{(j)}|i\rangle = |j\rangle + \sum_{i \neq j} c_i^{(j)}|i\rangle \quad (3.18)$$

Damit folgt für die Entwicklungskoeffizienten $c_p^{(j)}$:

$$\begin{aligned} p \neq j : \quad \langle p|H|\psi_j\rangle &= c_p^{(j)}\epsilon_p + \lambda\langle p|H_T|\psi_j\rangle + \lambda\sum_{i \neq j} c_i^{(j)}\langle p|H_T|i\rangle \\ \rightarrow c_p^{(j)} &= \lambda\frac{\langle p|H_T|\psi_j\rangle}{E_j - \epsilon_p} \quad (p \neq j) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Auf diese Weise erhält man einen Ausdruck für den zu entwickelnden Zustand:

$$|\psi_j\rangle = |j\rangle + \lambda\sum_{i \neq j} \frac{\langle i|H_T|\psi_j\rangle}{E_j - \epsilon_i}|i\rangle \quad (3.20)$$

Dieser Ausdruck ist als Iterationsformel aufzufassen, da die rechte Gleichungsseite von (3.20) sowohl den Zustand selbst als auch die Energie E_j enthält. Die Iterationsformel für die Energie ergibt sich aus (3.19), indem man $p = j$ setzt:

$$E_j = \epsilon_j + \lambda\langle j|H_T|\psi_j\rangle \quad (3.21)$$

Die beiden Formeln (3.20) und (3.21) werden nach folgendem Schema iteriert: Die nullte Näherung für den Zustand $|\psi_j\rangle$ ist der ungestörte Zustand $|\psi_j^{(0)}\rangle = |j\rangle$, die nullte Näherung der Energie E_j ist die ungestörte Energie $E_j^{(0)} = \epsilon_j$. Indem man $|\psi_j^{(0)}\rangle$ und $E_j^{(0)}$ in der rechten Gleichungsseite von (3.20) und (3.21) substituiert, ergeben sich die Näherungen

$|\psi_j^{(1)}\rangle$ und $E_j^{(1)}$. Substitution von $|\psi_j^{(1)}\rangle$ in der rechten Gleichungsseite der zweiten Iterationsformel (3.21), führt auf $E_j^{(2)}$. Diesem Iterationsschema folgend ergeben sich allgemeine Ausdrücke für den unnormierten Zustand $|\psi_j\rangle$ und die Energien E_j (sei $\langle i_1|H_T|i_2\rangle = U_{i_1,i_2}$):

$$\begin{aligned} |\psi_j^{(a-1)}\rangle &= |j\rangle + \lambda \sum_{i_1 \neq j} \frac{U_{i_1,j}}{E_j^{(a-2)} - \epsilon_{i_1}} |i_1\rangle \\ &+ \lambda^2 \sum_{i_1, i_2 \neq j} \frac{U_{i_1,i_2} U_{i_2,j}}{(E_j^{(a-3)} - \epsilon_{i_1})(E_j^{(a-3)} - \epsilon_{i_2})} |i_1\rangle \\ &\vdots \\ &+ \lambda^{a-1} \sum_{i_1, \dots, i_{a-1} \neq j} \frac{U_{i_1,i_2} U_{i_2,i_3} \dots U_{i_{a-1},j}}{(\epsilon_j - \epsilon_{i_1})(\epsilon_j - \epsilon_{i_2}) \dots (\epsilon_j - \epsilon_{i_{a-1}})} |i_1\rangle \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} E_j^{(a)} &= \epsilon_j + \lambda U_{j,j} + \lambda^2 \sum_{i_1 \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,j}}{E_j^{(a-2)} - \epsilon_{i_1}} \\ &\vdots \\ &+ \lambda^a \sum_{i_1, \dots, i_{a-1} \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,i_2} \dots U_{i_{a-1},j}}{(\epsilon_j - \epsilon_{i_1})(\epsilon_j - \epsilon_{i_2}) \dots (\epsilon_j - \epsilon_{i_{a-1}})} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Es ist zu beachten, daß die Ausdrücke (3.22) und (3.23) keine Reihenentwicklungen nach dem Störparameter λ darstellen. Die entsprechenden Potenzreihen, die als RSST-Formeln bezeichnet werden, folgen aus der Entwicklung der Nenner nach λ in (3.22) und (3.23). Beispielsweise ergibt sich für die Grundzustandsenergie in 4-ter Ordnung die Entwicklung ($U_{i,i} = 0$ für den Grundzustand):

$$\begin{aligned} E_j^{(4)} &= \epsilon_j + \lambda^2 \sum_{i_1 \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,j}}{\epsilon_j - \epsilon_{i_1}} \\ &+ \lambda^4 \left(\sum_{i_1, i_2, i_3 \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,i_2} U_{i_2,i_3} U_{i_3,j}}{(\epsilon_j - \epsilon_{i_1})(\epsilon_j - \epsilon_{i_2})(\epsilon_j - \epsilon_{i_3})} - e_2^{(j)} \sum_{i_1 \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,j}}{(\epsilon_j - \epsilon_{i_1})^2} \right) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Der Koeffizient $e_4^{(j)}$ setzt sich aus einem Anteil mit vier Wechselwirkungsmatrixelementen U_{i_1,i_2} und einem aus der 2-ten Ordnung (zwei Wechselwirkungsmatrixelemente) stammenden Anteil zusammen. Tatsächlich sind diese beiden Terme notwendig, da Beiträge $\propto N^2$ durch sie eliminiert werden. In höheren Ordnungen treten Terme $\propto N^2, \propto N^3, \dots, \propto N^{a/2}$ auf, wobei a die höchste Ordnung der Entwicklung bezeichnet. Dieses Beispiel verdeutlicht, daß die Koeffizienten $e_\mu^{(j)}$ nicht in geschlossener Form angegeben werden können. Dies ist ein großer Nachteil der RSST und macht die Berechnungen hoher Ordnungen zu einem ernsthaften Problem. Andererseits ist die Implementierung des Computeralgorithmus unkompliziert. RSST-Entwicklungen wurden bis zur 8-ten Ordnung für Grundzustandsenergien und für Magnondispersionen berechnet.

Bei der Berechnung von Anregungsenergien stößt man auf entartete Zustände. Dies soll am Beispiel des Magnons erläutert werden: Im Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ kann ein Magnon am Platz n

als lokale Spinabweichung charakterisiert werden (die exakte Definition dieser Anregung befindet sich in Abschnitt 3.4):

$$S_n^+ |N\text{eel}_1\rangle \propto | \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow_n \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow \rangle \quad (\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S, \downarrow \hat{=} -(S-1)) \quad (3.25)$$

Im durch $S_{tot}^z = 1$ definierten Unterraum gibt es $N/2$ entartete Zustände (3.25) mit Spinabweichungen an den Plätzen $n = 2, 4, \dots, N$. Da der Hamilton-Operator aufgrund der periodischen Randbedingungen mit dem Translationsoperator vertauscht, ist es möglich, eine Basis aus Eigenzuständen zum Hamilton-Operator und zum Translationsoperator zu finden. Diese Eigenzustände sind durch die Quantenzahlen Energie, Wellenvektor k und S_{tot}^z klassifiziert. Aus diesem Grund wird aus den Zuständen (3.25) eine Linearkombination konstruiert, die Eigenzustand des Translationsoperators ist:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik2n} | \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow_{2n} \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow \rangle. \quad (3.26)$$

Die Eigenwerte des Translationsoperators sind durch $\exp(i2k)$ mit $k = (2\pi/N)l$, $l = 1, 2, \dots, N/2$ gegeben. Die Entartung der Zustände $|\psi_k\rangle$ für verschiedene k wird für endliche λ durch den transversalen Teil des Hamilton-Operators aufgehoben. Die Zustände $|\psi_k\rangle$ stellen die geeigneten Ausgangszustände für die Störungstheorie dar. Prinzipiell muß zu jedem Wellenvektor k eine Potenzreihe für die Energie berechnet werden. Indem man jedoch die Berechnung der Koeffizienten der Reihenentwicklung in verschiedene Fälle untergliedert, ist es möglich, die Vorfaktoren der Terme $\cos(2k), \cos(4k) \dots$ in den einzelnen Ordnungen anzugeben. Diese Untergliederung soll schematisch dargestellt werden:

$$\begin{aligned} |n\rangle &= | \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow_n \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow \rangle \\ \left(\sum_n e^{-ikn} \langle n| \right) H_T |i_1\rangle U_{i_1, i_2} \dots \langle i_p | H_T | \left(\sum_n e^{-ikn} |n\rangle \right) &\rightarrow \cos(0) \\ \left(\sum_n e^{-ikn} \langle n| \right) H_T |i_1\rangle U_{i_1, i_2} \dots \langle i_p | H_T | \left(\sum_n e^{-ikn} |n \pm 2\rangle \right) &\rightarrow \cos(2k) \\ \left(\sum_n e^{-ikn} \langle n| \right) H_T |i_1\rangle U_{i_1, i_2} \dots \langle i_p | H_T | \left(\sum_n e^{-ikn} |n \pm 4\rangle \right) &\rightarrow \cos(4k) \\ &\vdots \end{aligned}$$

3.1.2 Rekursive Störungstheorie

Nun soll auf die RST, die im Zusammenhang mit Cluster-Entwicklungen von M.P. Gelfand, R.R.P. Singh und D.A. Huse aufgestellt wurde, eingegangen werden. Die Koeffizienten c_i^j in (3.18) werden folgendermaßen entwickelt:

$$c_i^j = \sum_{\mu=0}^{\infty} c_i^{(\mu, j)} \rightarrow |\psi_j\rangle = \sum_{\mu=0}^{\infty} \lambda^\mu |\psi_\mu^{(j)}\rangle \quad \text{mit} \quad |\psi_\mu^{(j)}\rangle = \sum_{i \neq j} c_i^{(\mu, j)} |i\rangle \quad (3.27)$$

Gemäß RSST gilt $|\psi_0^{(j)}\rangle = |j\rangle$ und $\langle j|\psi_\mu^{(j)}\rangle = 0$ für $\mu > 0$. Der Beitrag der Ordnung λ^μ zur Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\begin{aligned} H_I|\psi_\mu^{(j)}\rangle + H_T|\psi_{\mu-1}^{(j)}\rangle &= \frac{1}{\lambda^\mu} \sum_{\nu,\nu'} e_\nu^{(j)} |\psi_{\nu'}^{(j)}\rangle \lambda^{\nu+\nu'} \Big|_{\nu+\nu'=\mu} = \sum_{\nu=0}^{\mu} e_\nu^{(j)} |\psi_{\mu-\nu}^{(j)}\rangle \\ \Rightarrow e_\mu^{(j)} &= \langle j|H_T|\psi_{\mu-1}^{(j)}\rangle = \sum_{i \neq j} c_i^{(\mu-1,j)} \langle j|H_T|i\rangle \end{aligned} \quad (3.28)$$

Die Koeffizienten der Potenzreihe für die Energie $e_\mu^{(j)}$ sind durch die Entwicklungskoeffizienten $c_i^{(\mu-1,j)}$ bestimmt. Ebenfalls durch Koeffizientenvergleich erhält man eine Rekursionsformel für die $c_i^{(\mu,j)}$:

$$\begin{aligned} i \neq j \quad : \quad \langle i|H_I|\psi_\mu^{(j)}\rangle + \langle i|H_T|\psi_{\mu-1}^{(j)}\rangle &= \sum_{\nu=0}^{\mu} e_\nu^{(j)} \langle i|\psi_{\mu-\nu}^{(j)}\rangle \\ \Rightarrow c_i^{(\mu,j)} &= \frac{1}{\epsilon_i - \epsilon_j} \left(\sum_{\nu=1}^{\mu-1} e_\nu^{(j)} c_i^{(\mu-\nu,j)} - \sum_l c_l^{(\mu-1,j)} \langle i|H_T|l\rangle \right) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Die Rekursionsformel (3.29) bildet den Kern des Computeralgorithmus, der in Anhang B erläutert wird. Setzt man die Koeffizienten aus (3.29) sukzessive ineinander ein, so folgen mit (3.28) die Energieausdrücke der RSST. Die RST eignet sich insbesondere zur Berechnung hoher Ordnungen: Der Grundzustand des $S = 1/2$ xxz-Modells konnte bis zur 28-ten Ordnung, der des $S = 1$ Modells bis zur 20-ten Ordnung und für $S = 3/2, 2$ bis zur 18-ten Ordnung berechnet werden. Der maximale Speicheraufwand betrug nicht mehr als ca. 100MB, der maximale Zeitaufwand betrug weniger als vier Stunden auf einem Alpha-Prozessor. Ein weiterer Vorteil der Methode ist, daß nicht nur die Energie, sondern auch die unnormierte Wellenfunktion (bzw. die $c_i^{(\mu,j)}$) aus den Formeln (3.28) und (3.29) folgen. Damit ist die Berechnung von Potenzreihen für Erwartungswerte fast ohne Mehraufwand möglich. Der einzige jedoch unwesentliche Nachteil gegenüber RSST ist die Fixierung des Wellenvektors k bei angeregten Zuständen von Beginn an. Der Computeralgorithmus enthält eine Routine zur Berechnung von Matrixelementen $\langle i|H_T|l\rangle$, die den numerischen Wert des Wellenvektors benötigt. Das heißt, daß man für jeden k -Wert eine Entwicklung berechnen muß.

Ein allgemeiner Vorteil störungstheoretischer Methoden ist die Gültigkeit der Entwicklung im thermodynamischen Limes. Dabei ist zu bedenken, daß die Berechnung des Koeffizienten der Ordnung λ^a eine bestimmte Mindestgröße des Systems erfordert. Im Fall der Ising-artigen Störungstheorie für (3.1) ist diese Mindestgröße für den Grundzustand durch $N_{min} = a + 1$ gegeben. Diese Relation läßt sich auf anschauliche Weise erklären: Ein beliebiger Koeffizient der Störungsreihe enthält Beiträge von Zuständen mit *endlich* vielen Quantenfluktuationen. Da dieser Koeffizient im thermodynamischen Limes gültig sein soll, läßt sich folgern, daß es nicht zu einer Kopplung mit dem *zweiten* Néel-Zustand kommen darf, d.h. es darf keine Matrixelemente mit dem zweiten Néel-Zustand geben. Die Min-

destlänge der a -ten Ordnung ergibt sich dann aus der Forderung, daß die $a/2$ -fache Wirkung des Störoperators nicht auf den zweiten Néel-Zustand führt. Der eigentliche Grund für die Beziehung $N_{min} = a + 1$ ist jedoch die Tatsache, daß nur zusammenhängende Cluster zur Energie beitragen. Diese Eigenschaft sowie die Definition zusammenhängender Cluster werden in Anhang B erläutert.

Einen prinzipiellen Nachteil bringt das Konzept der Störungstheorie mit sich: Der störungstheoretische Zustand stellt eine adiabatische Entwicklung des ungestörten Zustands dar. Dies bedeutet aber, daß eine Reihenentwicklung nicht über eine Phasengrenze hinaus gültig sein kann. Reihenentwicklungen für Energielücke, Korrelationslänge, Strukturfaktor etc. weisen daher Singularitäten an den Phasenübergangspunkten auf.

Abschließend noch eine Bemerkung zur Einschränkung auf eindimensionale Systeme: Die durchgeführten Rechnungen konnten bis zu Ordnungen geführt werden, wie sie mit Cluster-Algorithmen möglich sind [60], [61], [12], [58], [24]. Die oben vorgestellten Methoden RSST und RST sind in keiner Weise auf irgendeine Dimension beschränkt. Für höhere Raumdimensionen würden jedoch mehr und mehr nichtzusammenhängende Cluster in die Rechnungen einfließen und damit die Effektivität herabsetzen. Dies erfordert Cluster-Algorithmen, welche die nichtzusammenhängenden Terme ausschließen.

3.2 Extrapolation singulärer Potenzreihen

In diesem Abschnitt werden Methoden zur Extrapolation singulärer Potenzreihen beschrieben. Die hier vorgestellten Methoden wurden in den sechziger Jahren zur Analyse divergenter thermodynamischer Größen im Zusammenhang mit der Theorie der Phasenübergänge entwickelt. Diese Methoden können auch zur Bestimmung kritischer Kopplungskonstanten und kritischer Exponenten bei Quanten-Phasenübergängen herangezogen werden. Es werden die *Ratio-Methode*, *Padé-Approximanden* und *Differentielle-Approximanden* vorgestellt. Die Theorie und Anwendung der Ratio-Methode sowie der Padé-Approximanden werden in [62] im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen dargestellt. Eine ausführliche Diskussion der Grundlagen von Padé-Approximanden findet man in dem Buch von G. A. Baker Jr. und J. L. Gammel [63]. Differentielle-Approximanden werden in [64] und [65] diskutiert.

Gegeben sei eine Potenzreihe

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad \text{mit} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} |a_n|^{-1/n} = z_c .$$

Es folgt, daß $F(z)$ für $|z| < z_c$ konvergiert, für $|z| > z_c$ divergiert und daher mindestens eine Singularität auf dem Konvergenzkreis $|z| = z_c$ hat.

Haben alle Koeffizienten a_n dasselbe Vorzeichen, so kann die Ratio-Methode zur Bestim-

mung der kritischen Größen herangezogen werden:

$$\mu_n = a_n/a_{n-1} \approx \frac{1}{z_c} \left[1 + \frac{g}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \right] \quad (n \rightarrow \infty) \quad (3.30)$$

Indem man die Paare $(1/n, \mu_n)$ durch eine Gerade approximiert, kann man z_c bzw. g aus y-Achsenabschnitt und Steigung bestimmen. Als Beispiel für eine Anwendung auf Quanten-Spinmodelle sei die Arbeit [61] zum eindimensionalen und zweidimensionalen $S = 1/2$ Heisenberg-Modell zitiert. Kritische Punkte und Exponenten wurden aus der Suszeptibilität, dem Strukturfaktor und dem Quadrat der Korrelationslänge bestimmt.

Die Padé-Approximande einer Funktion $F(z)$ ist durch die gebrochen rationale Funktion

$$[L, M]_F = \frac{p_0 + p_1 z + p_2 z^2 + \dots + p_L z^L}{q_0 + q_1 z + q_2 z^2 + \dots + q_M z^M}, \quad (q_0 = 1) \quad (3.31)$$

gegeben. Dabei sind die Koeffizienten $p_0, p_1, p_2, \dots, p_L$ und q_1, q_2, \dots, q_L so zu wählen, daß

$$F(z) = [L, M]_F + \mathcal{O}(z^{L+M+1}) \quad (3.32)$$

erfüllt ist. Die Koeffizienten $\{p_i\}$ und $\{q_j\}$ sind damit eindeutig festgelegt und können folgendermaßen berechnet werden: Die Koeffizienten der Potenzen z^{L+1} bis z^{L+M} in (3.32) führen auf ein lineares Gleichungssystem für die $\{q_j\}$

$$\sum_{m=1, r-m \geq 0}^M q_m a_{r-m} = 0, \quad r = L+1, \dots, L+M \quad (q_0 = 1). \quad (3.33)$$

Aus (3.33) läßt sich das Nennerpolynom in (3.31) für den Fall einer nichtverschwindenden Determinante des Gleichungssystems berechnen. Es ist zu bedenken, daß die $\{a_n\}$ vom Computer berechnete Fließkommazahlen sind. Daher wird der Wert dieser Determinante niemals exakt null sein. Es ist daher notwendig, die Approximande zu entwickeln und mit der ursprünglichen Funktion $F(z)$ zu vergleichen. Aus den Koeffizienten der Potenzen z^1 bis z^L ergeben sich die $\{p_i\}$ in Abhängigkeit der $\{q_j\}$:

$$p_l = \sum_{m=1, l-m \geq 0}^M q_m a_{l-m}, \quad l = 1 \dots L \quad (3.34)$$

Die sogenannten diagonalen Padé-Approximanden $[n, n]$, $n = 1, 2, \dots$ sind invariant unter Euler-Transformationen $z \rightarrow \frac{aw}{1+bw}$. Aus diesem Grund weisen die Sequenzen $[n, n]$ und die Sequenzen der *nahe-diagonalen* Approximanden $[n+j, n]$, $j \ll n$ das beste Konvergenzverhalten auf (vgl. [62]). Als Beispiel für diese Eigenschaft wird die singuläre Potenzreihe der Anregungslücke $\Delta(\lambda)$ eines S=2 SZD's diskutiert. Diese Domänenwandanregung wird im vierten Abschnitt definiert. Die Potenzreihe 14-ter Ordnung, sowie verschiedene Padé-Approximanden sind in Abbildung (3.3) dargestellt: Die Potenzreihe $[14, 0]_\Delta$ ist im Intervall $0 < \lambda \lesssim 0.2$ gültig. Die Approximanden $[12, 2]_\Delta$, $[10, 4]_\Delta$ verbessern die Konvergenz

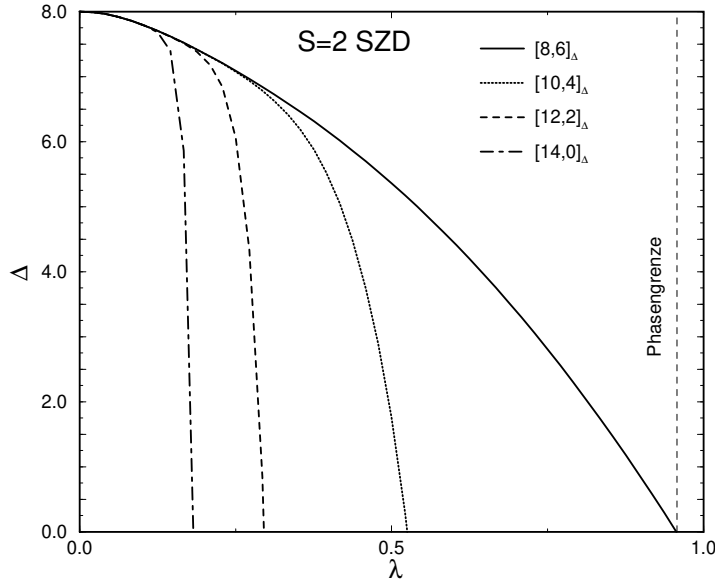


Abbildung 3.3: Konvergenz verschiedener Padé-Approximanden der Energielücke des $S = 2$ SZD's.

sukzessive bis zur nahe-diagonalen Approximande $[8, 6]_{\Delta}$, welche die beste Näherung von $\Delta(\lambda)$ im Intervall $0 < \lambda \leq \lambda_c$ darstellt. Die Approximande $[7, 7]$ existiert nicht, da die Potenzreihe lediglich gerade Potenzen in λ enthält. Padé-Approximanden sind im Gegensatz zur Ratio-Methode nicht an einen Vorzeichentyp gebunden. Darüberhinaus beschreiben sie die singuläre Funktion $F(z)$ im gesamten Bereich $|z| \leq z_c$. Padé-Approximanden eignen sich zur Analyse von Funktionen vom Typ

$$F(z) \approx \left(1 - \frac{z}{z_c}\right)^{-\eta} A(z), \quad A(z) \text{ regulär für } z = z_c .$$

Ist der Exponent $\eta \ll 1$, so führt die sogenannte *D-log-Padé-Approximande*

$$[L, M]_D, \quad D(z) = \frac{d}{dz} \ln(F(z)) \approx \frac{-\eta}{z - z_c} (1 + \mathcal{O}(z - z_c))$$

zu einer genaueren Abschätzung für den kritischen Exponenten.

Im Fall eines Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs [11] ist es sinnvoll, eine Approximande für $\ln(F(z))$ zu berechnen. Als Beispiel eines solchen Phasenübergangs sei die Energielücke der $S = 1/2$ xxz-Kette diskutiert: Die Anregungslücke ist gemäß (3.9) durch

$$\Delta(\lambda) = \sqrt{1 - \lambda^2} \frac{K(k)}{\pi} \sqrt{1 - k^2} = \sqrt{1 - \lambda^2} \frac{K'(k')}{\pi} |k'| \quad (3.35)$$

gegeben. Indem man (3.10) nach dem komplementären Modul k' entwickelt, erhält man (vgl. Anhang A):

$$\Delta(\lambda) \approx 2\pi e^{-\frac{\pi^2}{2\sqrt{2(1/\lambda-1)}}}, \quad 1 - \lambda \ll 1. \quad (3.36)$$

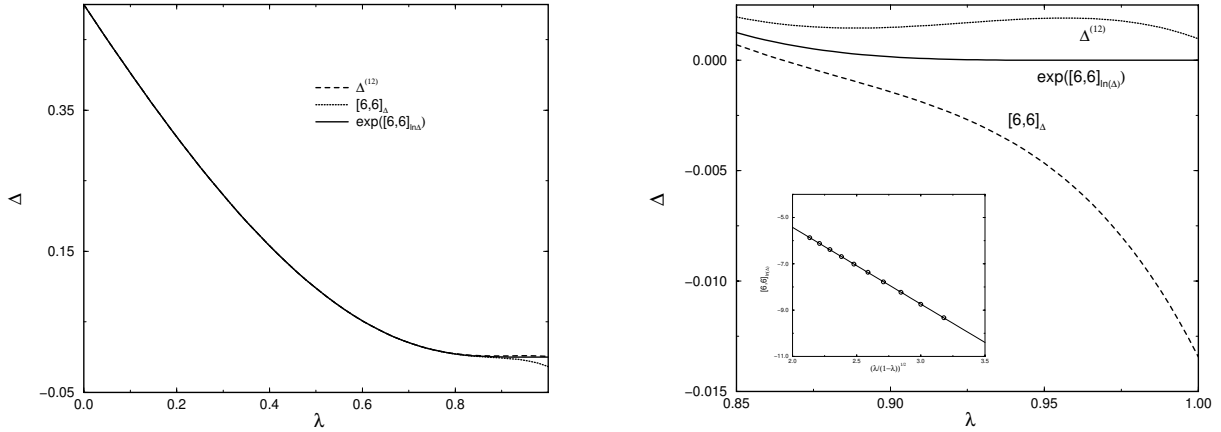


Abbildung 3.4:

Verschiedene Approximanden für die Energielücke der $S = 1/2$ -Kette. Im Bildeinsatz des rechten Teils wurde $[6, 6]_{\ln(\Delta)}$ (Ordinate) gegen $\sqrt{1/\lambda - 1}$ (Abszisse) aufgetragen.

In Abbildung (3.4) sind verschiedene Approximanden für $\Delta(\tau)$ dargestellt. Das exponentielle Verschwinden der Lücke gemäß (3.36) wird durch die logarithmische Padé-Approximande $[6, 6]_{\ln(\Delta)}$ hervorragend wiedergegeben. Im Bildeinsatz des rechten Teils von Abbildung (3.4) wurde die Approximande $[6, 6]_{\ln(\Delta)}$ (Ordinate) gegen $\sqrt{1/\lambda - 1}$ (Abszisse) aufgetragen. Somit kann der Faktor $\pi^2/\sqrt{8}$ auf ≈ 3.31 geschätzt werden.

Nun soll kurz auf Differentielle-Approximanden eingegangen werden. Es werden Singularitäten vor einem Hintergrundterm $B(z)$ untersucht:

$$F(z) = \left(1 - \frac{z}{z_c}\right)^{-\eta} A(z) + B(z) \quad (3.37)$$

Die Funktionen $A(z)$ und $B(z)$ sind regulär am kritischen Punkt $z = z_c$. Eine Funktion vom Typ (3.37) kann durch eine sogenannte inhomogene Differentielle-Approximande $F_{J/L,M}(z) = [J/L, M]_F$ genähert werden, die als Lösung der inhomogenen Differentialgleichung

$$U_J(z) + P_L(z)F_{J/L,M}(z) = Q_M(z)\frac{dF_{J/L,M}(z)}{dz} \quad (3.38)$$

mit der Anfangsbedingung $F_{J/L,M}(0) = F(0) = a_0$ definiert ist. $U_J(z)$, $P_L(z)$, $Q_M(z)$ sind Polynome der Ordnungen J , L , M und können durch die Amplitude $A(z)$ und den Hintergrundterm $B(z)$ ausgedrückt werden (s. [64]). Diese Polynome werden in Analogie zu den Padé-Approximanden durch die Bedingung

$$F(z) = F_{J/L,M}(z) + \mathcal{O}(z^{L+J+M+2}) \quad (3.39)$$

bestimmt. Der Grenzfall $Q_M = 0$ führt auf Padé-Approximanden, für $U_J = 0$ ergeben sich D-log-Padé-Approximanden. In diesem Sinne stellt $F_{J/L,M}(z)$ eine Verallgemeinerung der verschiedenen Padé-Approximanden dar.

Abschließend noch eine Bemerkung zur Extrapolation von Potenzreihen: Kritische Werte des Entwicklungsparameters und kritische Exponenten werden in dieser Arbeit aus diagonalen und nahe-diagonalen Padé- bzw. D-log-Padé-Approximanden bestimmt. Aus der Differenz der Resultate von $[n, n]$ und $[n + j, n - j]$, $j \ll n$ ergeben sich Fehlerintervalle, die umso kleiner sind, je besser die Approximanden konvergiert sind. Die Größe dieser Fehlerintervalle hängt jedoch davon ab, welche nahe-diagonalen Approximanden man einbezieht. Aus diesem Grund stellen die auf diese Weise ermittelten Intervalle lediglich eine Schätzung dar.

3.3 Grundzustandseigenschaften von xxz-Modellen

Thema dieses Abschnitts ist die Berechnung und die Diskussion von Grundzustandserwartungswerten für die Spinwerte $S = 1/2, 1, 3/2, 2$. Für $S = 1/2$ konnten Potenzreihen bis zur 28-ten Ordnung berechnet und mit Bethe-Ansatz-Ergebnissen für die Grundzustandsenergie und die Untergittermagnetisierung verglichen werden. Die Potenzreihen für $S = 1$ konnten bis zur 20-ten Ordnung, die für $S = 3/2, 2$ bis zur 18-ten Ordnung berechnet werden. Kritische Werte für den Entwicklungsparameter λ wurden mit Padé- bzw. D-log-Padé-Approximanden berechnet. Für die Bestimmung kritischer Exponenten wurden D-log-Padé-Approximanden verwendet.

3.3.1 Grundzustandsenergie

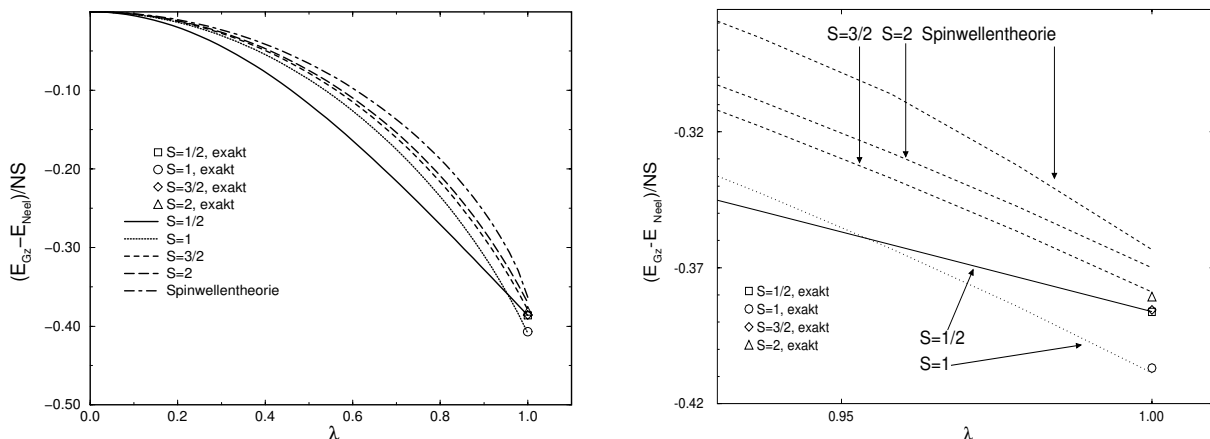


Abbildung 3.5: Aus Reihenentwicklungen bestimmte Grundzustandsenergien im Vergleich mit exakten Resultaten (Symbole). Im rechten Teil der Abbildung ist ein Ausschnitt für $\lambda \lesssim 1$ dargestellt.

Zunächst soll die Grundzustandsenergie diskutiert werden. Mittels RSST läßt sich folgender

für allgemeine S gültiger Ausdruck analytisch berechnen:

$$\frac{E_{Gz}}{N} = -S^2 - \lambda^2 \frac{S^2}{4S-1} + \lambda^4 \left\{ \begin{array}{l} -\frac{S^2(96S^3-108S^2+38S-3)}{4(4S-1)^3(8S-3)}, S > \frac{1}{2} \\ \frac{1}{16}, S = \frac{1}{2} \end{array} \right\} + \mathcal{O}(\lambda^6)$$

Bei der Berechnung des Koeffizienten a -ter Ordnung müssen die Fälle $S = 1/2$, $S = 1, \dots, S = (a/2 - 1)/2$ und $S > (a/2 - 1)/2$ unterschieden werden. Der Grund für diese Fallunterscheidungen ist die Tatsache, daß die a -fache Wirkung des Störoperators H_T auf die beiden Néel-Zustände für große Werte des Spins auf mehr Zustände führt, die zum Wert dieses Koeffizienten beitragen. Beispielweise bestimmen Matrixelemente zwischen dem ersten Néel-Zustand und Zuständen der Art $|S, -S, \dots, S, -(S-1), (S-1), -S, \dots, S, -S\rangle$ den Wert des Koeffizienten 2-ter Ordnung. Diese Zustände können für Systeme mit allgemeinem Spin S erzeugt werden. In 4-ter Ordnung ergeben sich jedoch auch Beiträge durch Zustände der Art $|S, -S, \dots, S, -(S-2), (S-2), -S, \dots, S, -S\rangle$. Solche Zustände treten ausschließlich in Systemen mit $S > 1/2$ auf.

Die Berechnung höherer Ordnungen erfordert Computeralgorithmen. RST-Potenzreihen für die Grundzustandsenergien sind in Anhang C tabelliert. Die Koeffizienten der $S = 1/2$ Entwicklung wurden mit der Bethe-Ansatz-Formel

$$\frac{E_{Gz}}{N} = -\sqrt{1-\lambda^2} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2n\nu} \tanh(n\nu) \quad \nu = \operatorname{arcosh}\left(\frac{1}{\lambda}\right) \quad (3.40)$$

verglichen [66]. Die Koeffizienten der Störungsreihe stimmen sämtlich mit den Entwicklungskoeffizienten von (3.40) überein, die Genauigkeit beträgt 4 Nachkommastellen für die höchste Ordnung. Die Reihenentwicklungen wurden mittels Padé-Approximanden extrapoliert, die Ergebnisse für die Grundzustandsenergien am isotropen Punkt sind in Tabelle (3.1) aufgeführt. Die in der vierten Spalte von Tabelle (3.1) aufgeführten Abweichungen ergeben

Spin	E_{Gz}/N (extrapol.)	E_{Gz}/N (exakt)	Abweichung	$(E_{Gz}-E_{\text{Néel}})/NS$ (exakt)
$\frac{1}{2}$	-0.443146 ± 10^{-6}	-0.443147	$5 \cdot 10^{-3}\%$	-0.3863
1	-1.41 ± 10^{-2}	-1.4069	1.4%	-0.4069
$\frac{3}{2}$	$-2.826 \pm 3 \cdot 10^{-3}$	-2.8283	0.14%	-0.3855
2	-4.7554 ± 10^{-4}	-4.7612	0.25%	-0.3806
∞	—	—	—	$2/\pi - 1$

Tabelle 3.1: Extrapolierte Werte der Grundzustandsenergien pro Spin und Platz im Vergleich zu numerisch exakten (DMRG) Daten am isotropen Punkt.

sich aus dem Vergleich der nahe-diagonalen Padé-Approximanden. Die Extrapolation der $S = 1$ Kette erweist sich als problematisch, da die nahe-diagonalen Padé-Approximanden Singularitäten im Intervall $0 \leq \lambda \leq 1$ haben. Tatsächlich ist es nicht sinnvoll, die Grundzustandsenergie der $S = 1, 2$ Kette am isotropen Punkt aus den Reihenentwicklungen zu

bestimmen, da man die Potenzreihen nicht über die Phasengrenze zur Haldane-Phase hinaus extrapolieren kann. Der exakte Grundzustand in der Haldane-Phase enthält beide Néel-Zustände, was mit einer vom Ising-Grenzfall ausgehenden Störungstheorie nicht erreicht werden kann. Die in Tabelle (3.1) angegebenen Grundzustandsenergien für $S = 1, 2$ sind daher als Abschätzungen zu betrachten. In Abbildung (3.5) ist die Absenkung der Grundzustandsenergie gegenüber dem klassischen Beitrag $-NS^2$ aufgetragen. Die Linien stellen nichtextrapolierte Reihenentwicklungen, die Symbole exakte Energien (DMRG) dar [67], [56], [54]. Im Intervall $0 \leq \lambda \lesssim 0.9$ sind die Energien gemäß $E_{Gz,S}(\lambda) < E_{Gz,S+1/2}(\lambda)$ angeordnet. Für $\lambda > 0.95$ liegt die Grundzustandsenergie der $S = 1$ Kette deutlich unter den Grundzustandsenergien der übrigen Systeme.

3.3.2 Ordnungsparameter

Weiterhin soll der Ordnungsparameter der Néel-Phase - die Untergittermagnetisierung pro Spin $\langle M_A \rangle_S$ - untersucht werden. In Abbildung (3.6) sind die normierten Approximanden

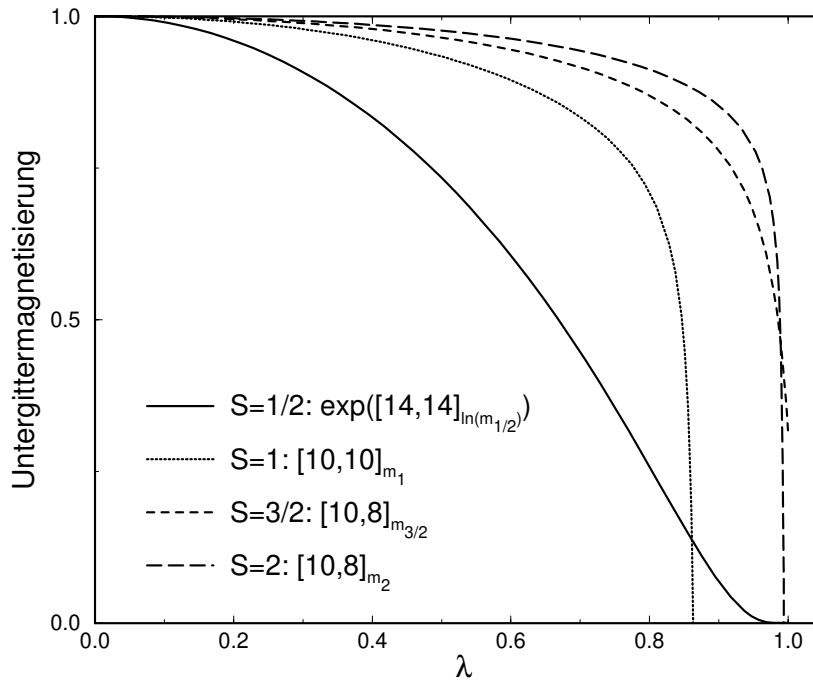


Abbildung 3.6: Approximanden für die Untergittermagnetisierungen

für $\langle M_A \rangle_S$ dargestellt. Im Fall des $S = 1/2$ Modells ist diese Größe durch die Formel

$$\langle M_A \rangle_{1/2} = \frac{1}{2} \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - Q^{2n}}{1 + Q^{2n}} \right)^2 = 2\sqrt{1 - k^2} \frac{K(k)}{2\pi} \quad (3.41)$$

$$Q^2 = e^{-\pi \frac{K'(k)}{K(k)}}, \quad \lambda = \frac{2Q}{1 + Q^2} \quad (3.42)$$

gegeben [68]. Analog zur Anregungslücke der $S = 1/2$ Kette (3.35), (3.36) kann man zeigen, daß $\langle M_A \rangle_S$ in der Umgebung des isotropen Punktes exponentiell verschwindet (vgl. Anhang A):

$$\langle M_A \rangle_{1/2} = 2|k'| \frac{K'(k')}{2\pi} \propto e^{-\frac{\pi^2}{4\sqrt{2(1/\lambda-1)}}}, \quad 1 - \lambda \ll 1 \quad (3.43)$$

Dieses Verhalten kann hervorragend mit der Approximanden $e^{[14,14]_{\ln(\langle M_A \rangle_{1/2})}}$ extrapoliert werden. Aus den Approximanden der Reihenentwicklungen des $S = 3/2$ Systems war es nicht möglich, auf ein exponentielles Verschwinden der Untergittermagnetisierung zu schließen. Der kritische Punkt $\lambda_c \approx 1$ dieses Systems wurde aus Padé-Approximanden bestimmt.

Für die Systeme mit ganzzahligem Spin ist es möglich, kritische Parameter λ_c sowie kritische Exponenten β_S mit $\langle M_A \rangle_S \propto (\lambda_c - \lambda)^{\beta_S}$ zu bestimmen. Die extrapolierten Werte sind in Tabelle (3.2) aufgeführt. Die Abweichungen sind aus nahe-diagonalen Approximan-

Spin	λ_c	β_S
$\frac{1}{2}$	1 ± 0.01	0
1	0.85 ± 0.01	0.12 ± 0.01
$\frac{3}{2}$	1.00 ± 0.02	?
2	$[\approx 0.99]$	$[\approx 0.12]$

Tabelle 3.2: Kritische Werte und Exponenten der Untergittermagnetisierung

den bestimmt worden. Es ist nicht zu erwarten, daß die aus der Untergittermagnetisierung (Einpunktfunktion) ermittelten kritischen Werte sehr präzise sind. Bessere Werte für die kritischen Punkte ergeben sich aus der Analyse der *Soft-Moden*. Die Daten in Tabelle (3.2) sind daher als Abschätzung der λ_c sowie deren Exponenten zu betrachten.

Der für $S = 1$ ermittelte Exponent β_1 stimmt mit dem aus [60] überein. Dies bestätigt die von Haldane vorhergesagte Zugehörigkeit des $S = 1$ Systems zur Universalitätsklasse des zweidimensionalen Ising-Modells. Der Exponent des Ordnungsparameters dieses Modells besitzt den Wert $\beta = 1/8$ [69]. In Abbildung (3.6) ist zu erkennen, daß der kritische Punkt für $S = 2$ bei kleineren λ liegen muß als der des $S = 3/2$ Systems, da sich die beiden Kurven in der Umgebung des isotropen Punktes schneiden. Für den kritischen Punkt sowie den entsprechenden Exponenten erhält man die ungefähre Schätzung (s. Tabelle (3.2)) $\lambda_c \approx 0.99$, $\beta_2 \approx 0.12$. (Für diese Werte wurden keine Fehlergrenzen angegeben, da die nahe-diagonalen Padé-Approximanden große Abweichungen von den diagonalen Approximanden aufweisen.)

Abschließend sei bemerkt, daß sich $\langle M_A \rangle_S$ für große Werte des Spins immer mehr einer Stufenfunktion annähert. Daher konzentriert sich das durch $\beta = 1/8$ charakterisierte kritische Verhalten der Systeme mit ganzzahligem Spin für große S auf ein immer kleineres Intervall um λ_c . Aus diesem Grund ist $\langle M_A \rangle_2$ schwieriger zu extrapolieren als $\langle M_A \rangle_1$.

3.3.3 Domänenwandkonzentrationen

Um eine Vorstellung davon zu bekommen, wie sich die vollkommen geordneten Néel-Zustände für anwachsende λ mit Quantenfluktuationen *anreichern*, sollen nun Domänenwanderwartungswerte für die Systeme mit $S = 1/2, 3/2$ berechnet werden. Es handelt sich dabei nicht um singuläre Funktionen zur Bestimmung kritischer Punkte, sondern die Betrachtung dieser Erwartungswerte dient ausschließlich dem Verständnis des physikalischen Bildes. Domänenwände können im Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ als lokale Übergänge zwischen den

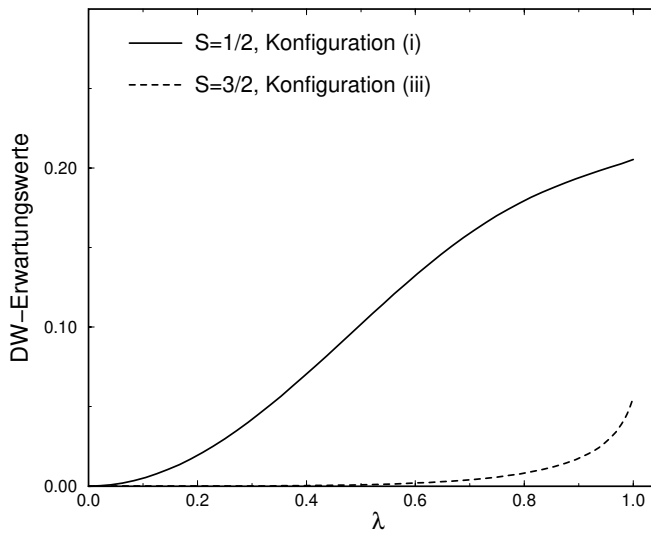


Abbildung 3.7: Normierte Domänenwanderwartungswerte für $S = 1/2, 3/2$

beiden Néel-Zuständen charakterisiert werden (die exakte Definition dieser Anregungstypen befindet sich in Abschnitt 3.4). Diesen lokalen Übergängen entsprechen folgende Spinkonfigurationen:

$$\begin{aligned}
 (i) \quad S = \frac{1}{2} & : \uparrow\uparrow \quad \text{und} \quad \downarrow\downarrow \quad (S^z = \pm \frac{1}{2} \hat{=} \uparrow\downarrow) \\
 (ii) \quad S = \frac{3}{2} & : \uparrow\uparrow\uparrow \quad \text{und} \quad \downarrow\downarrow\downarrow \quad (S^z = \pm \frac{3}{2} \hat{=} \uparrow\downarrow) \\
 (iii) \quad S = \frac{3}{2} & : \uparrow\uparrow, \uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \downarrow\downarrow \quad (S^z = \pm \frac{3}{2} \hat{=} \uparrow\downarrow, S^z = \pm \frac{1}{2} \hat{=} \uparrow\downarrow)
 \end{aligned}$$

Die Konzentration dieser Spinkonfigurationen im Grundzustand kann durch die Berechnung der Erwartungswerte

$$(i) \quad S = \frac{1}{2} : \frac{1}{2S^2} \langle (S^2 + S_n^z S_{n+1}^z) \rangle \quad (3.44)$$

$$(ii) \quad S = \frac{3}{2} : \left(\frac{4}{405}\right) \langle \left(\frac{9}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{3}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{3}{4} - S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{1}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{1}{4} - S_n^z S_{n+1}^z\right) \rangle \quad (3.45)$$

$$(iii) \quad S = \frac{3}{2} : -\left(\frac{2}{3}\right)^3 \langle \left(\frac{3}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{9}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{9}{4} - S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{1}{4} + S_n^z S_{n+1}^z\right) \left(\frac{1}{4} - S_n^z S_{n+1}^z\right) \rangle \quad (3.46)$$

gemessen werden. Die Berechnung von (3.44) für die $S = 3/2$ Kette mißt nicht das Auftreten einer einzelnen Domänenwand, sondern ein Gemisch verschiedener Konfigurationen. Die nichtextrapolierten Potenzreihen der Erwartungswerte (3.44) und (3.46) sind in Abbildung (3.7) dargestellt. ((3.44) wurde bis zur 28-ten, (3.46) bis zur 18-ten Ordnung berechnet). Die Größe (3.45) wurde nicht in Abbildung (3.7) aufgeführt, da die Zahlenwerte sehr klein sind. Für das $S = 1/2$ System ergibt sich am isotropen Punkt eine Domänenwandkonzentration von (3.44) = 0.205 ± 0.001 . Der exakte Wert dieser Größe ergibt sich aus der Grundzustandsenergie E_{Gz}/N :

$$S = \frac{1}{2} : \frac{1}{2S^2} \langle (S^2 + S_n^z S_{n+1}^z) \rangle = \frac{2}{3} (1 - \ln(2)) \approx 0.20456 \quad (3.47)$$

3.3.4 Statischer Strukturfaktor

Zur weiteren Analyse der Grundzustandsordnung wurden Korrelationsfunktionen berechnet. In der Néel-Phase nehmen die asymptotischen Korrelationsfunktionen die Form

$$(-1)^r \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle = (\langle M_A \rangle)^2 + A \frac{e^{-r/\xi}}{r^{\eta_S}}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (3.48)$$

$$\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle' := \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle - \langle S_n^z \rangle \langle S_{n+r}^z \rangle \quad (3.49)$$

an. Der Exponent $\eta_S = \eta_S(\lambda)$ ist eine Funktion der Anisotropie; an den kritischen Punkten tritt universelles Verhalten auf. Theoretisch ist es möglich, die Korrelationslänge $\xi(\lambda)$ und den Exponenten $\eta_S(\lambda)$ aus (3.49) für verschiedene Werte von r zu bestimmen. Dabei treten jedoch zwei Probleme auf: Für kleine Werte von r können die Korrelationsfunktionen nicht durch die asymptotische Form (3.48) beschrieben werden. Für größere Abstände r verschwinden die niedrigen Ordnungen von (3.49), d.h. $\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle' = 0 + \mathcal{O}(\lambda^{a(r)})$. Aus diesen Gründen ist es nicht möglich, zuverlässige Extrapolationen für $\xi(\lambda)$ und $\eta_S(\lambda)$ aus den Korrelationsfunktionen (3.49) direkt abzuleiten. Beispiele für die Ordnung $a(r)$ sind in

Spin	$a(2)$	$a(3)$	$a(4)$	$a(5)$	$a(6)$	$a(7)$	$a(8)$	$a(9)$
$\frac{1}{2}$	4	4	6	6	8	8	10	10
1	4	4	6	6	8	8	10	10
$\frac{3}{2}$	4	4	6	6	8	10	12	14
2	4	4	6	6	10	12	14	18

Tabelle 3.3: Die Ordnungen $a(r)$, die durch $\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle' = 0 + \mathcal{O}(\lambda^{a(r)})$ definiert sind, für verschiedene S .

Tabelle (3.3) angegeben. Der Strukturfaktor

$$S^{zz}(\pi) = \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle' \propto \int_0^{\xi} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{\eta_S}} dr \propto \begin{cases} \ln(\xi) & : \eta_S = 1, (\xi \rightarrow \infty) \\ \xi^{1-\eta_S} & : \eta_S \neq 1, (\xi \rightarrow \infty) \end{cases} \quad (3.50)$$

erweist sich als geeignete Größe zur Untersuchung des kritischen Verhaltens der Korrelationen (vgl. z.B. [60], [61], [12]). Zur Berechnung des Strukturfaktors wurden die Autokorrelationen ($r = 0$) nicht mit einbezogen. Die Werte der kritischen Punkte sowie der kritischen Exponenten werden dadurch nicht beeinflusst, jedoch zeigen die Potenzreihen ein besseres Konvergenzverhalten. Padé-Approximanden für die Kehrwerte der Strukturfaktoren sind in Abbildung (3.8) dargestellt. Für $S = 1/2$ konnte das Ergebnis von [12] bestätigt werden, für $S = 1$ wurden Potenzreihen bis zur 18-ten Ordnung berechnet. Störungsreihen für $S = 3/2, 2$ konnten bis zur 16-ten Ordnung bestimmt werden. Die Berechnung

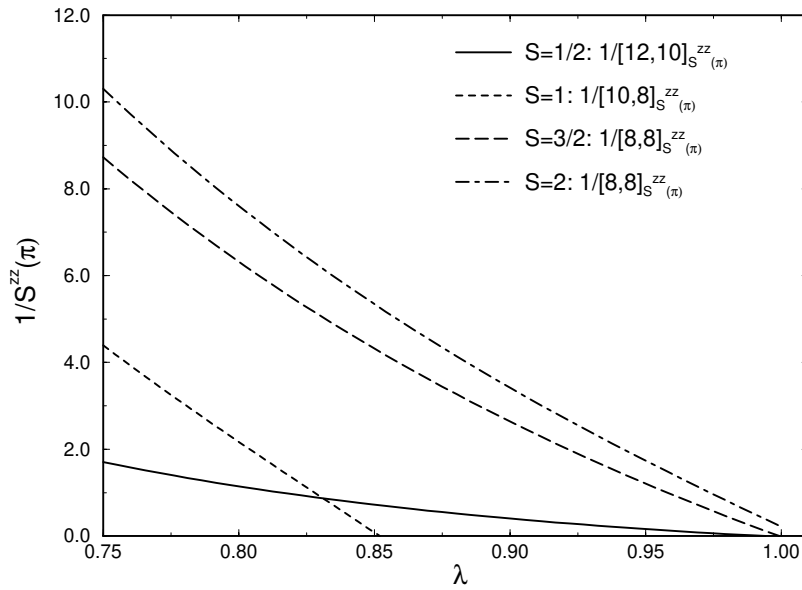


Abbildung 3.8: Padé-Approximanden für die Kehrwerte der Strukturfaktoren.

der Strukturfaktoren bis zu einer bestimmten Ordnung erfordert Korrelationsfunktionen von $r = 1$ bis zu einem maximalen $r = r_{max}$ gemäß Tabelle (3.3). Beispielsweise werden Korrelationsfunktionen bis $r_{max} = 9$ für den $S = 2$ Strukturfaktor bis zur 16-ten Ordnung benötigt. Die kritischen Punkte des Strukturfaktors sowie die kritischen Exponenten σ_S^{zz} , $S^{zz}(\pi) \propto 1/(\lambda_c - \lambda)^{\sigma_S^{zz}}$ wurden mit D-log-Padé-Approximanden berechnet und sind in Tabelle (3.4) aufgeführt.

Spin	λ_c	σ_S^{zz}
$\frac{1}{2}$	0.99 ± 0.02	1.1 ± 0.1
1	0.84 ± 0.01	0.73 ± 0.07
$\frac{3}{2}$	0.99 ± 0.01	1.02 ± 0.03
2	$[\approx 1]$	$[\approx 0.87]$

Tabelle 3.4: Kritische Werte und Exponenten des Strukturfaktors

Zunächst sollen die Systeme mit halbzahligen Spin diskutiert werden. Der Exponent $\sigma_{1/2}^{zz} = 1.1 \pm 0.01$ stimmt mit dem von R. R. P. Singh berechneten Wert überein und führt zu einer Kontroverse von longitudinaler und transversaler Korrelation [12]. Dieses scheinbar widersprüchliche Verhalten wird durch das Einbeziehen multiplikativer logarithmischer Korrekturen zu (3.48) erklärt. Gemäß [56] gehören die $S = 1/2$ Kette und $S = 3/2$ Kette zur selben Universalitätsklasse, die unter anderem durch $\eta = 1$ am kritischen Punkt charakterisiert ist. In Übereinstimmung damit ergibt sich aus den Approximanden näherungsweise $\sigma_{3/2}^{zz} \approx \sigma_{1/2}^{zz}$ am isotropen Punkt.

Im folgenden werden die Exponenten η_S für die Ketten mit den ganzzahligen Spins $S = 1, 2$ bestimmt. Zur Berechnung dieser Exponenten benötigt man weitere Informationen über das kritische Verhalten der Korrelationslängen. Die Korrelationslängen können in Zusammenhang mit den Energielücken gebracht werden:

Eindimensionale Heisenberg-Antiferromagneten werden im Kontinuums-Limes durch Lorentz-invariante Feldtheorien beschrieben. Aus der Lorentz-Invarianz dieser effektiven Beschreibungen folgt, daß das kritische Verhalten der Korrelationen in Raum- und Zeitrichtung gleich ist. Da die Energielücke proportional zum Kehrwert der Korrelationslänge in Zeitrichtung ist, ergibt sich $\Delta \cdot \xi = c$ in der Umgebung des kritischen Punktes, wobei Δ die Energielücke ist. Im Rahmen der effektiven Beschreibung gilt diese Beziehung für alle Werte des Spins. Man nimmt an, daß die Beziehung $\Delta \cdot \xi = c$ auch für Gittermodelle gültig ist. Für die Korrelationslängen der xxz-Modelle gilt unter dieser Annahme $\xi \propto 1/\Delta$ in der Umgebung des kritischen Punktes λ_c .

Diese Relation läßt sich anhand zweier Beispiele für Gittermodelle analytisch überprüfen. Einerseits folgt $\xi \propto 1/\Delta$, $\lambda \rightarrow \lambda_c = 1$ für die $S = 1/2$ Kette aus Bethe-Ansatz-Resultaten (vgl. (3.36)), andererseits gilt die Relation im Grenzfall $S \rightarrow \infty$ für LSWT. Gemäß Gleichung (3.4) ergibt sich für die Energielücke des Magnons $\Delta \propto \sqrt{\tau}$, $\tau = 1 - \lambda \ll 1$. Die Korrelationslänge läßt sich analog zu (2.26) berechnen: $1/\xi_{long} \propto \sqrt{\tau}$, $\tau = 1 - \lambda \ll 1$.

Indem man die Information über das kritische Verhalten der Energielücke $\Delta \propto (\lambda_c - \lambda)^\nu$ verwendet, die in Abschnitt 3.4 analysiert wird, ist es möglich, den Exponenten η zu bestimmen. Aus (3.50) sowie der Relation $\xi \propto 1/\Delta$ ergibt sich der Zusammenhang $\nu(1 - \eta_S) = \sigma_S^{zz}$, der in der Umgebung des kritischen Punktes gültig ist. Für die $S = 1$ Kette findet man gemäß Tabelle (3.5), Abschnitt 3.4, den Exponenten $\nu = 1.01 \pm 0.02$. In Übereinstimmung mit Haldane's Vermutung ergibt sich der Exponent $\eta_1 \approx 0.25$. Dieser Exponent gehört wie der des Ordnungsparameters $\beta_1 \approx 1/8$ zur Universalitätsklasse des zweidimensionalen Ising-Modells. Für die $S = 2$ Kette ergibt sich aus Tabelle (3.5), Abschnitt 3.4, $\nu \approx 1$. Aus der Relation $\nu(1 - \eta_S) = \sigma_S^{zz}$ (s. Tabelle (3.4)) folgt der Exponent $\eta_2 \approx 0.13$, der deutlich von η_1 abweicht. Daraus läßt sich jedoch nicht folgern, daß es sich um eine Abweichung vom kritischen Verhalten des zweidimensionalen Ising-Modells handelt. Es ist zu bedenken, daß die Reihenentwicklung von $S^{(zz)}(\pi)$, $S = 2$ bis zur 16-ten Ordnung lediglich Korrelationsfunktionen $\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle$ bis zu einem maximalen Abstand von $r_{max} = 9$ enthält. Aus dieser Reihenentwicklung ergibt sich mittels Padé- und D-log-Padé-Approximanden

nur eine ungefähre Schätzung des kritischen Punktes von $\lambda_c \approx 1$. Man kann nicht erwarten, aus derselben Potenzreihe einen präzisen Wert für den Exponenten η_2 zu erhalten.

3.4 Elementare Anregungen in xxz-Modellen

Um den Unterschied zwischen xxz-Modellen mit halbzahligem und ganzzahligem Spin weiter herauszuarbeiten, sollen nun die niederenergetischen (elementaren) Anregungen untersucht werden.

3.4.1 Klassifikation der niederenergetischen Anregungen

Ziel dieses Unterabschnitts ist die Klassifikation der niederenergetischen Anregungen für das antiferromagnetische Spin S Heisenberg-Ising-Modell im Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$. Die betrachteten Zustände werden durch die S^z -Projektionen der Spins dargestellt und sind Eigenvektoren des Ising-Modells ($\lambda = 0$). Die Energieeigenwerte des Ising-Modells werden gemäß Abschnitt 3.1 mit ϵ bezeichnet.

Der Grundzustand sowie die niederenergetischen Anregungen werden durch die Randbedingungen und die Magnetisierung S_{tot}^z klassifiziert. Dabei müssen Ketten mit N ungerade von Ketten mit N gerade, wobei N die Anzahl der Gitterplätze ist, unterschieden werden.

3.4.1.1 N ungerade

Zunächst soll N ungerade mit periodischen Randbedingungen untersucht werden. Für diesen Fall sind die beiden in (3.7) definierten Néel-Zustände $|\text{Néel}_1\rangle$ und $|\text{Néel}_2\rangle$ nicht die Grundzustände. Die Spinkonfigurationen zum niedrigsten Eigenwert des Ising-Modells sind durch einen lokalen Übergang zwischen den Néel-Zuständen charakterisiert. Dabei sind die Konfigurationen zu unterscheiden, an denen dieser Übergang an einem geraden/ungeraden Platz lokalisiert ist ($\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S$):

$$\begin{array}{c} \overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{Néel}_1} m_{2n} \underbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}_{\text{Néel}_2} \\ \overbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{Néel}_2} m_{2n} \underbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}_{\text{Néel}_1} \end{array} \quad \begin{array}{c} \overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{Néel}_1} m_{2n'+1} \underbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}_{\text{Néel}_2} \\ \overbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{Néel}_2} m_{2n'+1} \underbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}_{\text{Néel}_1} \end{array} \quad (3.51)$$

$$\begin{array}{c} \overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{Néel}_1} m_{2n} \underbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}_{\text{Néel}_2} \\ \overbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{Néel}_2} m_{2n} \underbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}_{\text{Néel}_1} \end{array} \quad \begin{array}{c} \overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}^{\text{Néel}_1} m_{2n'+1} \underbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}_{\text{Néel}_2} \\ \overbrace{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}^{\text{Néel}_2} m_{2n'+1} \underbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}_{\text{Néel}_1} \end{array} \quad (3.52)$$

Die S^z -Projektion nimmt an den Plätzen $2n$ beziehungsweise $2n'+1$ die Werte $m_{2n}, m_{2n'+1} = -S, -(S-1), \dots, S-1, S$ an. Für den Fall $|m_{2n}|, |m_{2n'+1}| = S$ gleichen sich die beiden Konfigurationen in (3.51) beziehungsweise (3.52) bis auf eine Translation. Die Entartung der Konfigurationen (3.51) und (3.52) beträgt jeweils $2SN$.

Die Energie der diesen Konfigurationen entsprechenden Zustände beträgt $\epsilon = (N-2)S^2$. Diese Energie soll auf die Energie pro Platz $\epsilon_{\text{Néel}}/N = -S^2$ der beiden Néel-Zustände

bezogen werden: $\Delta\epsilon_{\text{odd}} = -(N-2)S^2 + NS^2 = 2S^2$. Es sei nochmals betont, daß die Néel-Zustände als Grundzustände in Ketten mit einer ungeraden Anzahl von Plätzen nicht existieren. Dennoch ist die Definition von $\Delta\epsilon_{\text{odd}}$ sinnvoll, da die Spinkonfigurationen (3.51) und (3.52) in Systemen mit N gerade paarweise auftreten können. Die Anregungsenergie $\Delta\epsilon$ eines solchen Paares ist $2\Delta\epsilon_{\text{odd}}$.

Die Konfigurationen (3.51) und (3.52) sind durch die Magnetisierung $S_{\text{tot,odd}}^z$, dem Eigenwert des Operators $\hat{S}_{\text{tot,odd}}^z = \sum_{n=1}^N S_n^z$, N **ungerade** charakterisiert. Diese Magnetisierung wird durch den Wert der S^z -Projektion am Übergangspatz bestimmt, d.h. $S_{\text{tot,odd}}^z = m_{2n}, m_{2n'+1}$. Wie in (3.26) erläutert, ist es notwendig, Eigenzustände zum Translationsoperator T zu konstruieren. T bezeichnet den Operator, der Translationen um einen Gitterplatz erzeugt. Aufgrund der periodischen Randbedingungen existieren Matrixelemente zwischen den Spinkonfigurationen (3.51) und (3.52):

$$|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \xrightarrow{(H_T)^{2S}} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \xrightarrow{(H_T)^{2S}} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$$

Die zu konstruierenden Linearkombinationen können daher nicht unabhängig für (3.51) und (3.52) aufgestellt werden.

Die Fälle $|S_{\text{tot,odd}}^z| = S$, $0 < |S_{\text{tot,odd}}^z| < S$ und $|S_{\text{tot,odd}}^z| = 0$ sollen separat betrachtet werden. Die resultierenden Zustände werden als **Domänenwände** bezeichnet.

$|S_{\text{tot,odd}}^z| = S$: Bei vorgegebener Magnetisierung $S_{\text{tot,odd}}^z$ findet man $2 \cdot N/2$ entartete Zustände; Eigenzustand zu T ist die Linearkombination

$$|_{\text{DW}}; k, S_{\text{tot,odd}}^z = S\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n-1)} |\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2n-1}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad (3.53)$$

$$+ \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n)} |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow_{2n}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle. \quad (3.54)$$

Entsprechend ist der Zustand $|_{\text{DW}}; k, S_{\text{tot,odd}}^z = -S\rangle$ definiert. Die Entartung der Zustände $|_{\text{DW}}; k, \pm S\rangle$ für verschiedene k -Werte wird für endliche λ durch Propagation des Übergangs der beiden Néel-Zustände aufgehoben. Durch die Wirkung von $[(S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+)]^{2S}$ wird dieser Übergang um zwei Plätze versetzt. Somit enthält die Störungsreihe für die Dispersionsrelation $\omega(k)$ einen Term $\dots \cos(2k)$ in der Ordnung λ^{2S} .

$0 < |S_{\text{tot,odd}}^z| < S$: Bei vorgegebener Magnetisierung $S_{\text{tot,odd}}^z$ findet man $4 \cdot N/2$ entartete Zustände; geeigneter Ausgangszustand für die Störungstheorie ist die symmetrische/antisymmetrische Linearkombination ($\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S, \uparrow \hat{=} m$)

$$|_{\text{DW}}^\pm; k, S_{\text{tot,odd}}^z = m\rangle = \quad (3.55)$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik2n} \{ |\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow_{2n-1}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \pm |\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2n}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \} +$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n+1)} \{ |\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow \uparrow_{2n} \uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow \uparrow_{2n+1} \downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \}$$

wobei m die Werte $m = 1/2, 3/2, \dots, S-1$ für Systeme mit halbzahligem Spin und $m = 1, 2, \dots, S-1$ für Systeme mit ganzzahligem Spin annimmt. Die Zustände $|\text{DW}^\pm; k, S_{tot, \text{odd}}^z = \tilde{m}\rangle$ mit $\tilde{m} = -1/2, -3/2, \dots, -(S-1)$ beziehungsweise $\tilde{m} = -1, -2, \dots, -(S-1)$ werden auf analoge Weise konstruiert. Für endliche Anisotropien λ ergeben sich entsprechend der symmetrischen/antisymmetrischen Linearkombination zwei Anregungszweige $\omega^\pm(k)$. Die Störungsreihen der Dispersionsrelationen $\omega^\pm(k)$ enthalten in der Ordnung λ^{S+m} , ($\lambda^{S-\tilde{m}}$) einen Term $\dots \cos(2k)$, der aus der Propagation des Übergangs der beiden Néel-Zustände um zwei Gitterplätze resultiert.

$|S_{tot, \text{odd}}^z| = 0$: Für die Magnetisierung $S_{tot, \text{odd}}^z = 0$ findet man $4 \cdot N/2$ entartete Zustände. Als **SZD** wird folgende symmetrische/antisymmetrische Linearkombination bezeichnet:

$$\begin{aligned} |s_{\text{ZD}}^\pm; k\rangle = & \quad (3.56) \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n-1)} |\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow 0_{2n-1} \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \pm \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik2n} |\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow 0_{2n} \downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \right) + \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{n=1}^{N/2} e^{ik2n} |\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow 0_{2n} \uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \pm \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n+1)} |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow 0_{2n+1} \downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \right) \end{aligned}$$

Für endliche Anisotropien λ ergeben sich entsprechend der symmetrischen/antisymmetrischen Linearkombination zwei Anregungszweige $\omega^\pm(k)$. Die Dispersionsrelationen enthalten in der Ordnung λ^S einen Term $\dots \cos(k)$, der aus der Propagation

$$\dots \downarrow\uparrow 0_n \downarrow\uparrow \dots \xrightarrow{(H_T)^S} \dots \uparrow\downarrow 0_{n+1} \uparrow\downarrow \dots$$

resultiert. Somit sind die Dispersionsrelationen $\omega^\pm(k)$ des SZD's im Gegensatz zu denen der oben diskutierten Domänenwände 2π -periodisch.

Ein weiterer Unterschied zu den Dispersionsrelationen der durch $0 < |S_{tot, \text{odd}}^z| < S$ definierten Domänenwände ist die Beziehung $\omega^+(k) = \omega^-(k+\pi)$ zwischen den Anregungszweigen des SZD's. Diese Beziehung resultiert aus der Tatsache, daß die Störungsreihen der Dispersionsrelationen Terme der Art $\dots \cos(k(2i-1))$, $\dots \cos(k2i)$ mit $i = 1, 2, \dots$ sowie konstante Terme enthalten. Die \cos -Terme ergeben sich aus der Propagation der Nullprojektion um eine gerade/ungerade Anzahl von Plätzen:

$$\dots \cos(k(2i-1)) : \dots \downarrow\uparrow 0_n \downarrow\uparrow \dots \xrightarrow{(H_T)^{rS}} \dots \uparrow\downarrow 0_{n+r} \uparrow\downarrow \dots \quad (r = 2i-1) \quad (3.57)$$

$$\dots \cos(k(2i)) : \dots \downarrow\uparrow 0_n \downarrow\uparrow \dots \xrightarrow{(H_T)^{rS}} \dots \downarrow\uparrow 0_{n+r} \downarrow\uparrow \dots \quad (r = 2i) \quad (3.58)$$

Die Matrixelemente, die der Propagation (3.57) entsprechen, enthalten das \pm Vorzeichen der symmetrischen/antisymmetrischen Linearkombination in (3.56). Somit unterscheiden

sich die Reihenentwicklungen für $\omega^\pm(k)$ ausschließlich durch die Terme $\dots \pm \cos(k(2i - 1))$. Indem man das negative Vorzeichen als Phase in der \cos -Funktion berücksichtigt, folgt $\omega^+(k) = \omega^-(k + \pi)$.

3.4.1.2 N gerade, $S > 1/2$

Nun soll der Fall N gerade mit periodischen Randbedingungen für Systeme mit $S > 1/2$ betrachtet werden. Die Grundzustandsenergie $\epsilon_{\text{Néel}} = -NS^2$ ist zweifach entartet, die Grundzustände sind die beiden Néel-Zustände $|\text{Néel}_1\rangle$ und $|\text{Néel}_2\rangle$. Die niedrigste Anregung ist eine Spinabweichung, die durch die lokalen Operatoren S_l^+ oder S_l^- erzeugt wird ($\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S$, $\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm (S - 1)$):

$$\begin{aligned} S_{2n}^+ |\text{Néel}_1\rangle &\propto |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow \downarrow_{2n} \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle, & S_{2n'+1}^+ |\text{Néel}_2\rangle &\propto |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow \downarrow_{2n'+1} \uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \\ S_{2m+1}^- |\text{Néel}_1\rangle &\propto |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \uparrow_{2m+1} \downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle, & S_{2m'}^- |\text{Néel}_2\rangle &\propto |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow \uparrow_{2m'} \downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Insgesamt findet man $2N$ entartete Zustände mit einer lokalen Spinabweichung. Die Anregungsenergie dieser Zustände beträgt $\Delta\epsilon = 2S$, wobei $\Delta\epsilon$ die Energiedifferenz zwischen dem angeregten Zustand und den Néel-Zuständen bezeichnet. Die durch S_n^\pm erzeugten Spinabweichungen unterscheiden sich durch die Quantenzahl $S_{\text{tot}}^z = \pm 1$. Wie in (3.26) erläutert, ist es notwendig, Eigenfunktionen zum Translationsoperator \tilde{T} zu konstruieren:

$$|\text{MAG}; k, S_{\text{tot}}^z = 1\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik2n} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow \downarrow_{2n} \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad (3.59)$$

$$|\text{MAG}; k, S_{\text{tot}}^z = -1\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n-1)} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow \uparrow_{2n-1} \downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad (3.60)$$

Diese Zustände werden als **Magnonen** oder **Spinwellen** bezeichnet und stellen die geeigneten Ausgangszustände für die Störungstheorie dar. \tilde{T} bezeichnet hier den Translationsoperator, der Translationen um zwei Gitterplätze erzeugt. Eine Translation um einen Gitterplatz, angewendet auf (3.59) oder (3.60), führt auf Magnonen, die sich aus dem zweiten Néel-Zustand ergeben und mit (3.59), (3.60) entartet sind. Diese Entartung ist jedoch belanglos, da weder die beiden Néel-Zustände noch die aus ihnen resultierenden Magnonen in der Störungstheorie miteinander koppeln (d.h. Matrixelemente miteinander haben).

Die Propagation der oben definierten Spinabweichung wird im Fall einer endlichen Anisotropie λ möglich. Entsprechend enthält der Koeffizient a -ter Ordnung der Reihenentwicklung für die Dispersionsrelation Terme der Art $\dots \cos(2k)$, $\dots \cos(4k)$, \dots , $\dots \cos(ak)$. Mittels RSST findet man folgende Reihenentwicklung für die Dispersionsrelation [70]:

$$\omega(k) = 2S + \lambda^2 \left(\frac{S}{4S-1} - \frac{2S^2}{2S-1} \cos^2(k) \right) + \mathcal{O}(\lambda^4) \quad S > \frac{1}{2} \quad (3.61)$$

3.4.1.3 N gerade, $S = 1/2$

Die Grundzustände des $S = 1/2$ Systems mit periodischen Randbedingungen und einer geraden Anzahl von Gitterplätzen N sind ebenfalls die beiden Néel-Zustände $|\text{Néel}_1\rangle$ und $|\text{Néel}_2\rangle$. Zur Anregungsenergie $\Delta\epsilon = 2S$ existieren jedoch mehr entartete Zustände als für die Systeme mit $S > 1/2$ ($\uparrow, \downarrow \hat{=} \pm S$):

$$|\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2n+1}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2p}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow_{2n'}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2p'+1}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \quad (3.62)$$

$$|\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow_{2m}\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow_{2l+1}\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad |\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow_{2m'+1}\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow_{2l'}\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \quad (3.63)$$

Die lokale Spinabweichung beziehungsweise das durch $S_{tot}^z = 1$ charakterisierte Magnon des $S = 1/2$ Systems, welches sich in (3.62) für $p = n + 1$, ($p' = n' + 1$) ergibt, ist Teil eines 2-Domänenwandzustands. Entsprechendes gilt für das durch $S_{tot}^z = -1$ charakterisierte Magnon. Aufgrund der periodischen Randbedingungen sind die beiden Typen von Spinkonfigurationen in (3.62) nicht unabhängig voneinander. Beispielsweise gilt

$$\left. |\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2n+1}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2p}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \right|_{\substack{2n+1=1 \\ 2p=N}} = \\ \left. |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow_{2n'}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2p'+1}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \right|_{\substack{2n'=N \\ 2p'+1=1}} \propto S_1^+ |\text{Néel}_2\rangle .$$

N. Isihimura und H. Shiba [8] stellten den Ansatz

$$|\psi\rangle = \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{N/2} e^{ik(2n-1)} \sum_{r=1}^{N/2} c_r |\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2n-1}\uparrow\downarrow \dots \downarrow\uparrow_{2(n+r-1)}\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad (3.64)$$

zur Berechnung der Störungstheorie in erster Ordnung auf. Dabei handelt es sich um entartete Störungstheorie zur Bestimmung der Koeffizienten c_r . Die Anregungsenergie des Zustands (3.64) ist die Summe der Anregungsenergien zweier Domänenwände $|\text{DW}; k, S_{tot, \text{odd}}^z = 1/2\rangle$. Für Systeme mit $S > 1/2$ gibt es ebenfalls Möglichkeiten Magnonen mit 2-Domänenwandzuständen zu koppeln. Der Zusammenhang zwischen Magnonen und Domänenwänden wird in Unterabschnitt 3.4.4 diskutiert.

3.4.2 Domänenwände

Für Domänenwandanregungen konnten RST-Reihen bis zur 16-ten Ordnung berechnet werden. Eine Ausnahme stellen die Zustände $|\text{DW}^\pm; k, S_{tot, \text{odd}}^z = \pm 1\rangle$ und $|\text{SZD}^\pm; k\rangle$ des $S = 2$ Systems dar, deren Reihenentwicklungen bis zur 14-ten Ordnung bestimmt wurden. Im Fall des $S = 1/2$ Systems wurde die RST-Reihe für die niedrigste Mode mit einer Entwicklung des Bethe-Ansatz-Resultats (3.9) verglichen (s. Anhang A). Sämtliche Koeffizienten der beiden Reihenentwicklungen stimmen überein. Die Störungsreihe für den SZD des $S = 1$ Systems wurde bis zu 10-ten Ordnung mit einer Entwicklung von R. R. P. Singh verglichen [24]. Auch hier stimmen sämtliche Koeffizienten überein. In Abbildung (3.10) sind die niedrigsten Anregungsenergien der Domänenwände für $S = 1, 2$ denen der $S = 1/2, 3/2$ Ketten gegenübergestellt.

3.4.2.1 Ganzzahlige S

Bei beiden Systemen mit ganzzahligem Spin sind die Soft-Moden durch die SZD's gegeben. Zur Verdeutlichung dieser Tatsache wurden die SZD's in Abbildung (3.10) hervorgehoben. Für die $S = 2$ Kette ergibt sich ein dem $S = 1$ System analoges physikalisches Bild: Der Phasenübergang von der Néel-Phase in die Haldane-Phase wird durch Kondensation von SZD's bewirkt.

Im $S = 1$ Modell liegt die Anregungsenergie des Zustands $|\text{DW}; k = 0, S_{tot,odd}^z = 1\rangle$ deutlich über der niedrigsten Mode $\omega^+(\pi)$ des SZD's und ist für den Phasenübergang ohne Bedeutung.

Im $S = 2$ Modell liegt die niedrigste Mode $\omega^-(\pi)$ des $S = 2$ SZD's im Bereich $0 \leq \lambda \lesssim 0.1$ über der Anregungsenergie des Zustands $|\text{DW}^-; k = 0, S_{tot,odd}^z = 1\rangle$, da die Potenzreihe dieser Anregung im Gegensatz zu der des SZD's eine nichtverschwindende negative 1-te Ordnung enthält. Die Anregungsenergie der durch $S = S_{tot,odd}^z = 2$ klassifizierten Domänenwand liegt deutlich über der des Zustands $|\text{DW}^-; k = 0, S_{tot,odd}^z = 1\rangle$, lediglich in der Nähe des kritischen Punktes lassen sich für diese beiden Anregungen keine Aussagen treffen. (Die nahe-diagonalen Padé-Approximanden weisen für $\lambda \approx 0.9$ große Abweichungen voneinander auf). Die Approximanden für die Mode $\omega^+(0)$ des Zustands $|\text{DW}^+; k = 0, S_{tot,odd}^z = 1\rangle$ weisen bereits für $\lambda \approx 0.6$ große Abweichungen voneinander auf, weshalb diese Mode nicht dargestellt wurde.

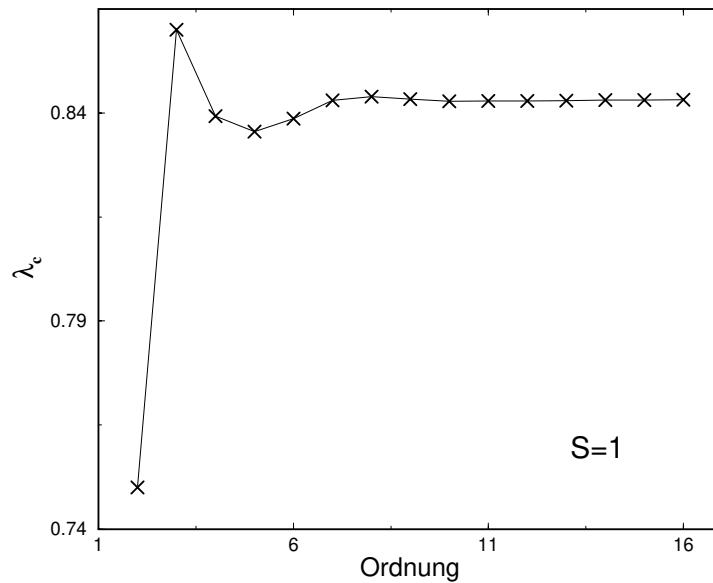


Abbildung 3.9: Konvergenz des kritischen Punktes für $S = 1$. Die durchgezogene Linie ist eine Orientierungshilfe.

Der kritische Wert λ_c kann für die $S = 1$ Kette in 16-ter Ordnung bis auf 4 Nachkommastellen genau bestimmt werden und beträgt $\lambda_c = 0.84316 \pm 0.00005$. Abbildung (3.9) illustriert die Konvergenz der aus den verschiedenen Ordnungen bestimmten λ_c . Die λ_c wurden aus den $[a/2, a/2]_\Delta$ Approximanden bestimmt, wobei a die Ordnung bezeichnet.

Der kritische Punkt der $S = 2$ Kette kann bei weitem nicht so exakt wie der des $S = 1$ Modells bestimmt werden. In 6-ter Ordnung ergibt sich $\lambda_c \approx 0.77$, in 10-ter Ordnung $\lambda_c \approx 0.89$ für die Lage des kritischen Punktes. In 14-ter Ordnung wird der Wert durch die Approximande $[8, 6]_\Delta$ auf $\lambda_c \approx 0.96$ verbessert. Im Vergleich mit den Ergebnissen der Untergittermagnetisierung und des statischen Struktur factors ist $\lambda_c \approx 0.96$ als untere Grenze für die Lage des kritischen Punktes zu betrachten. Es ist zu erwarten, daß sich der Wert durch Untersuchungen höherer Ordnungen in Richtung des isotropen Punktes verschiebt.

Tatsächlich handelt es sich bei der Störungsreihe für die Anregungslücke der $S = 2$ Kette um eine Entwicklung bis zur 7-ten Ordnung nach dem Parameter $x = \lambda^2$. Der Grund für das Verschwinden der ungeraden Ordnungen hängt mit der Propagation des SZD's zusammen: Der $S = 1$ SZD kann durch die Wirkung des transversalen Hamilton-Operators um einen Platz nach links oder rechts springen, der $S = 2$ SZD benötigt die zweifache Wirkung für diesen Vorgang. Dies ist einer der Gründe, warum die Berechnung von λ_c , $S = 2$ sehr viel höhere Ordnung als im $S = 1$ Fall erfordert.

Der in Abschnitt 3.3 eingeführte Exponent ν , $\Delta \propto (\lambda_c - \lambda)^\nu$ kann für $S = 1$ durch D-log-Padé-Approximanden zu $\nu = 1.01 \pm 0.02$ bestimmt werden. Für die $S = 2$ Kette zeigen diese Approximanden eine sehr schlechte Konvergenz. Der Exponent ν kann lediglich durch eine log-log-Darstellung von $[8, 6]_\Delta$ auf $\nu \approx 1$ geschätzt werden.

3.4.2.2 Halbzahlige S

In der $S = 1/2$ xxz-Kette existieren ausschließlich die durch $|S_{tot,odd}^z| = 1/2$ charakterisierten Domänenwandanregungen. Gemäß (3.35) zeigt die niedrigste Mode $\omega(\pi/2) = \Delta$ das für einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang typische exponentielle Verschwinden

$$\Delta(\lambda) \approx 2\pi e^{-\frac{\pi^2}{\sqrt{8(1/\lambda-1)}}}, \quad 1 - \lambda \ll 1,$$

welches, wie in Abbildung (3.4) gezeigt wurde, durch die logarithmische Approximande $\exp([6, 6]_\Delta)$ genähert werden kann. Die Singularität am isotropen Punkt beeinflusst die Krümmung von $\Delta(\lambda)$ im gesamten Intervall $0 \leq \lambda < 1$.

Die Extrapolation der Domänenwände des $S = 3/2$ Modells gestaltet sich weniger eindeutig. Padé-Approximanden führen auf das kritische Verhalten $\omega^-(\pi/2) \propto (\lambda_c - \lambda)^\nu$ mit $\lambda_c = 1.00 \pm 0.02$, $\nu = 1.0 \pm 0.15$ für den Zustand $|DW^-; k = \pi/2, S_{tot,odd}^z=1/2\rangle$ und $\omega(\pi/2) \propto (\lambda_c - \lambda)^\nu$ mit $\lambda_c = 1.01 \pm 0.03$, $\nu \approx 0.4$ für den Zustand $|DW; k = \pi/2, S_{tot,odd}^z=3/2\rangle$. Die Exponenten wurden mit D-log-Padé-Approximanden berechnet. Da die $S = 3/2$ Kette am isotropen Punkt derselben Universalitätsklasse wie die $S = 1/2$ Kette angehört, erwartet man eine exponentiell verschwindende Energielücke Δ , $S = 3/2$

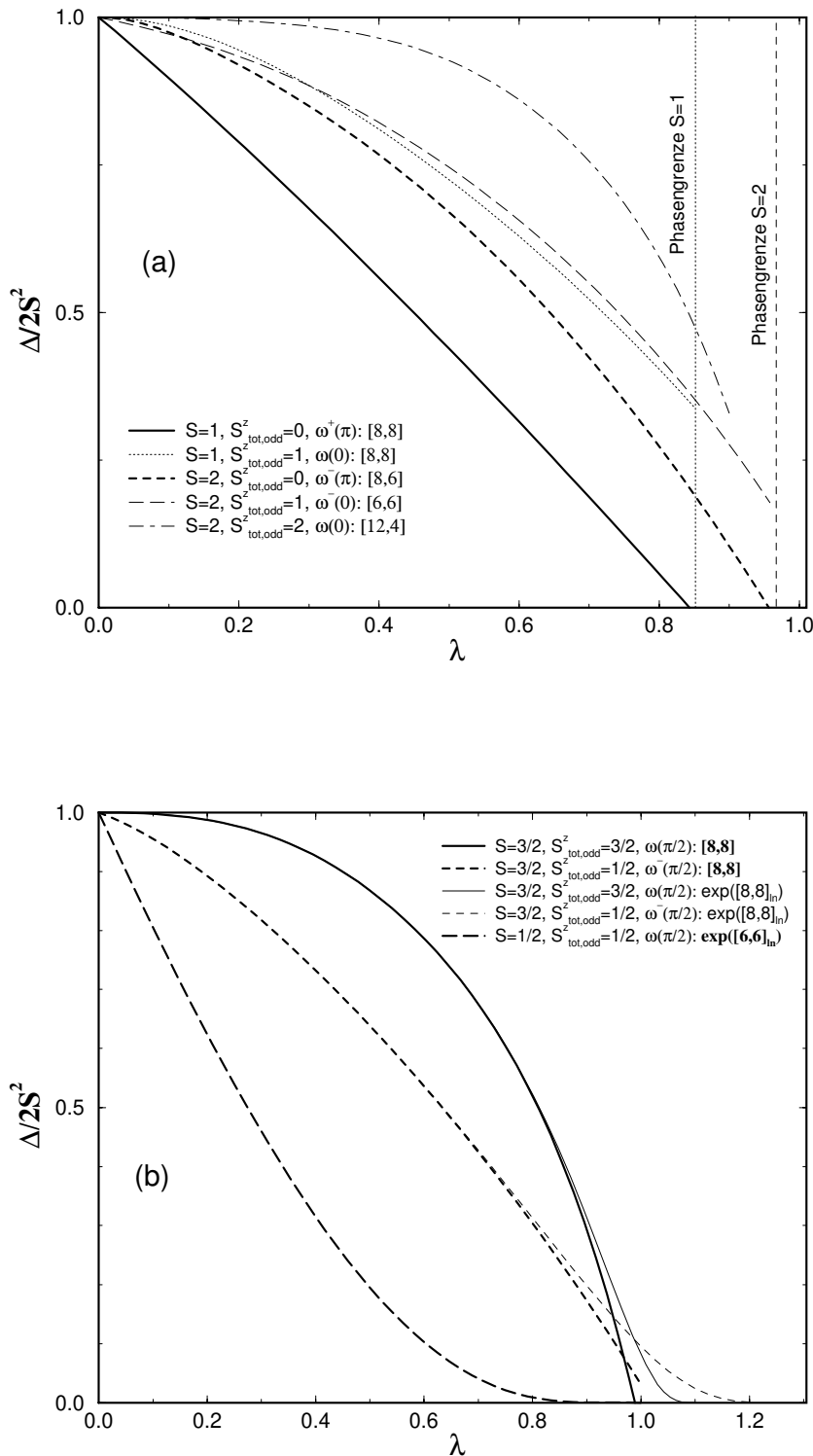


Abbildung 3.10: (a): Anregungslücken $\Delta/2S^2$ der Domänenwandanregungen für Ketten mit ganzzahligen Spins $S = 1, 2$. Die Soft-Moden (SZD's) wurden hervorgehoben. (b): Die Lücken der entsprechenden Anregungen in Ketten mit halbzahligen Spins $S = 1/2, 3/2$. Die logarithmischen Approximanden für $S = 3/2$ wurden dünn gedruckt dargestellt.

am isotropen Punkt. Aus diesem Grund wurden die niedrigsten Moden auf exponentielles Verschwinden hin untersucht. Die Approximande $\exp([8, 8]_{\ln(\omega^-(\pi/2))})$ der Domänenwand $|\text{DW}^-; k = \pi/2, S_{\text{tot,odd}}^z = 1/2\rangle$ sowie die Approximande $\exp([8, 8]_{\ln(\omega(\pi/2))})$ der Domänenwand $|\text{DW}; k = \pi/2, S_{\text{tot,odd}}^z = 3/2\rangle$ führen jedoch auf λ_c , die deutlich größer als der isotrope Punkt sind. Diese Approximanden sind dünn gedruckt in Abbildung (3.10,b) dargestellt. Die Abweichungen der $\exp([n+j, n-j]_{\ln})$, $j = \pm 1, \pm 2$ Approximanden voneinander sind zu groß, als daß man ein Aussage über ein exponentielles Verschwinden der Energielücke machen könnte. An dieser Stelle läßt sich folgern:

- Eine exponentiell divergierende $S = 3/2$ Korrelationslänge ist konsistent mit den Daten des statischen Strukturfaktors $S^{zz}(\pi)$.
- Existiert eine am isotropen Punkt exponentiell verschwindende Domänenwandmode, so würde die entsprechende Singularität den Verlauf dieser Mode nur in unmittelbarer Nähe des kritischen Punktes $\lambda_c = 1$ beeinflussen. Im Gegensatz dazu bestimmt die Singularität des $S = 1/2$ Modells am isotropen Punkt die Krümmung der niedrigsten Mode in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda < 1$.

Die kritischen Eigenschaften der $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ Systeme wurden der Übersichtlichkeit halber in Tabelle (3.5) zusammengefaßt.

Spin	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2
Δ	$\exp\left(-\frac{\pi^2}{\sqrt{8(\lambda_c/\lambda-1)}}\right)$	$(\lambda_c - \lambda)^\nu$?	$(\lambda_c - \lambda)^\nu$
λ_c	1	0.84316 ± 0.00005	1.00 ± 0.02	≈ 0.96
ν	—	1.01 ± 0.02	—	≈ 1

Tabelle 3.5: Kritische Punkte und Exponenten der Energielücken für $S = 1/2, 1, 3/2, 2$.

3.4.3 Magnonen

Für Magnonanregungen wurden einerseits RSST-Potenzreihen mit expliziter k -Abhängigkeit bis zur 8-ten Ordnung, andererseits RST-Reihen mit fixierten k -Werten bis zur 16-ten Ordnung berechnet (Anhang C). Die Störungsreihen zeigen ein gutes Konvergenzverhalten: Beispielsweise führt die Approximande $[4, 4]$ der $\omega_{S=3/2}(0)$ Magnonmode auf $\lambda_c^{(mag)} \approx 1.04$. In 16-ter Ordnung wird dieser Wert mit $[8, 8]$ um 3% auf $\lambda_c^{(mag)} \approx 1.01$ verbessert. Dabei bezeichnet $\lambda_c^{(mag)}$ den Wert der Anisotropie, für den das Magnon instabil wird. Die nichtextrapolierten Zahlenwerte weichen von den durch Padé-Approximanden extrapolierten Daten um ca. 1% ab.

3.4.3.1 Dispersion

Zunächst sollen die RST-Reihen für die niedrigsten Magnonmoden $\omega_S(k = 0)$ diskutiert werden. In Abbildung (3.11,a) sind Approximanden für diese Moden zusammen mit dem LSWT-Resultat $\omega_{\text{LSWT}}(0)/S = 2\sqrt{1 - \lambda^2}$ dargestellt. Im gesamten Intervall $0 \leq \lambda \lesssim 1$ gilt $\omega_S(0)/S < \omega_{S+1}(0)/(S+1)$. Dabei ist zu bedenken, daß die Spinwelle als Anregung über einem der Néel-Zustände nur in der Néel-Phase existiert. Aus diesem Grund wurden die $S = 1, 2$ Phasengrenzen zwischen Néel-Phase und Haldane-Phase in Abbildung (3.11) dargestellt. Im Fall des $S = 3/2$ Systems verläuft die Anregungslücke der Spinwelle in der Umgebung des isotropen Punktes wie

$$\omega_{S=3/2} \propto (\lambda_c^{(\text{mag})} - \lambda)^{\nu_{\text{mag}}}, \text{ mit } \lambda_c^{(\text{mag})} = 1.00 \pm 0.02, \nu_{\text{mag}} = 0.64 \pm 0.05,$$

im Gegensatz zum LSWT-Resultat $\nu_{\text{mag}} = 1/2, S \rightarrow \infty$.

In Abbildung (3.11,b) sind nichtextrapolierte RSST-Reihen (8-te Ordnung) für Magnondispersionen abgebildet. Die Dispersionsrelationen unterscheiden sich durch eine abnehmende Bandbreite mit zunehmendem Spin. Die funktionale Form von $\omega(k)$ ist näherungsweise unabhängig von der Größe des Spins. Insbesondere am isotropen Punkt erwartet man für Systeme mit halbzahligen S eine Dispersionsrelation $\omega(k) \propto |\sin(k)|$.

3.4.3.2 $S = 3/2$ Spinwellengeschwindigkeit

Die Spinwellengeschwindigkeit γ_S ist für isotrope Systeme mit halbzahligen Spin durch $\omega_S(k) = 2S \gamma_S k, k \ll \pi$ definiert. Nimmt man an, daß das klassische Spinwellenspektrum $\omega_{\text{LSWT}} = 2S |\sin(k)|$ durch die Quantenfluktuationen in Systemen mit endlichem Spin S für alle k -Werte gleichermaßen renormiert wird, so ist es möglich, die Spinwellengeschwindigkeit aus $\omega_S(k) = 2S \gamma_S |\sin(k)|$ zu bestimmen. In Abbildung (3.12) ist zu erkennen, daß die $\omega_S(\pi/2)$ Mode im Vergleich zur $\omega_S(0)$ in der Umgebung des isotropen Punktes weniger variiert. Aus diesem Grund eignet sich die $\omega_S(\pi/2)$ Mode zur Bestimmung der Spinwellengeschwindigkeit [24].

Für $S = 1/2$ ergibt sich aus der Spinon-Dispersion [5] bzw. aus Gleichung (3.9) $\gamma_{1/2} = \pi/2$. Im klassischen Grenzfall sinkt dieser Wert gemäß der LSWT-Dispersion (3.4) auf $\gamma_{\text{LSWT}} = 1$. Im Fall des $S = 3/2$ Systems wurde eine RST-Reihe für die $\omega_S(\pi/2)$ Mode berechnet:

$$S = \frac{3}{2} : \quad \omega_S(\pi/2) = 3 + \frac{3}{10}\lambda^2 + 0.1042\lambda^4 + 0.0594\lambda^6 + 0.0093\lambda^8 \quad (3.65) \\ + 0.0078\lambda^{10} + 0.0059\lambda^{12} + 0.0046\lambda^{14} + 0.0038\lambda^{16}$$

Padé-Approximanden dieser Reihe führen auf eine Spinwellengeschwindigkeit von

$$S = \frac{3}{2} : \quad \gamma_S = \frac{1}{2S} \omega_S \left(\frac{\pi}{2} \right) = 1.17 \pm 0.007. \quad (3.66)$$

Der mit QMC berechnete Wert beträgt $\gamma_{3/2} \approx 1.2$ [57]. Das DMRG-Resultat $\gamma_{3/2} \approx 1.29$ [56] stimmt besser mit den in CsVCl₃ experimentell ermittelten Daten $\gamma_{3/2} = 1.26 \pm 0.2$ überein [71].

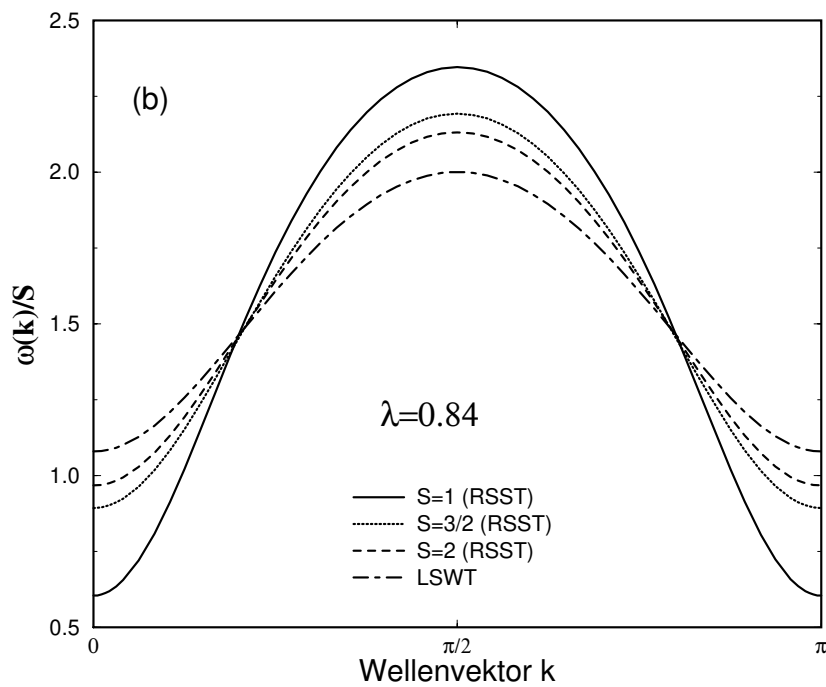
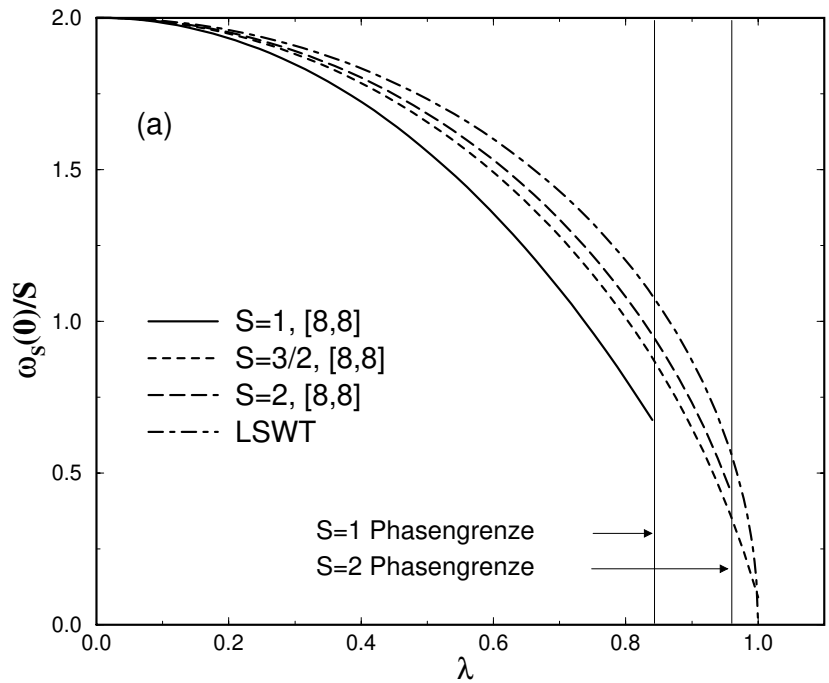


Abbildung 3.11: (a): Padé-Approximanden von RST-Reihen (16-te Ordnung) für die niedrigsten Magnonmoden. (b): RSST-Reihen für Magnondispersionen in 8-ter Ordnung für verschiedene Werte des Spins.

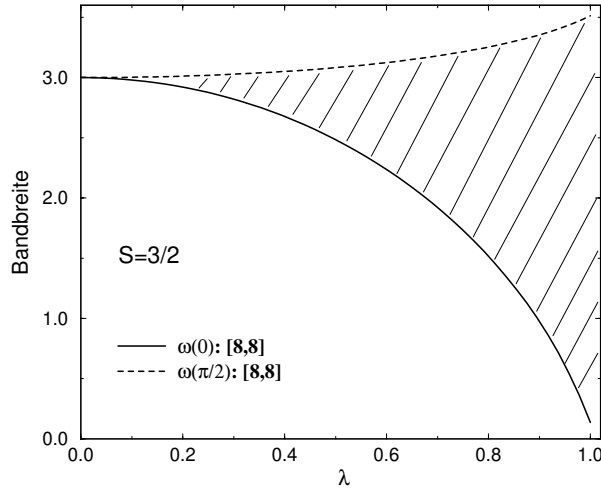


Abbildung 3.12: Padé-Approximande für die Magnonmoden $\omega_{S=3/2}(0)$ und $\omega_{S=3/2}(\pi/2)$

3.4.4 Zusammenhang zwischen Magnonen und Domänenwänden

Die lokale Spinabweichung beziehungsweise das Magnon der $S = 1/2$ Kette wurde in (3.62,3.63), (3.64) als Teil eines 2-Domänenwandzustands charakterisiert. Für Systeme mit $S > 1/2$ gibt es in den Unterräumen $|S_{tot}^z| = 1$ ebenfalls einen Zusammenhang zwischen Magnonen und Domänenwänden. In diesen Unterräumen können 2-Domänenwandzustände auftreten, die durch $|m^{(1)} + m^{(2)}| = 1$, ($m^{(1)} < m^{(2)}$) charakterisiert sind. Dabei bezeichnen $m^{(1)}, m^{(2)}$ den Wert der S^z -Projektion an den Übergangsplätzen zwischen den Néel-Zuständen.

$$S = 1: \quad \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \overbrace{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow}^{m^{(1)} \quad l \text{ Plätze}} \overbrace{\uparrow}^{m^{(2)}} \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \quad (\uparrow\downarrow \hat{=} \pm 1) \quad (3.67)$$

Die aus den 2-Domänenwandzuständen gebildeten Eigenzustände zum Translationsoperator enthalten neben dem Schwerpunktswellenvektor k einen Wellenvektor q , welcher der Impuls der Relativbewegung der beiden Wände ist. Dieser zusätzliche Freiheitsgrad führt im niederenergetischen Spektrum zu einem Energiekontinuum, welches im folgenden als Kontinuum bezeichnet wird. Diese Kontinua sollen durch $S_{tot}^z = m^{(1)} + m^{(2)}$ klassifiziert werden. Beispielsweise wird das Kontinuum der Zustände (3.67) durch $S_{tot}^z = 0 + 1 = 1 + 0$ charakterisiert.

Da es nichtverschwindende Matrixelemente zwischen 2-Domänenwandzuständen und Magnonen gibt, enthalten die störungstheoretischen Wellenfunktionen der Magnonen diese Zustände. Beispielsweise schließt die Wellenfunktion des $S = 1$ Magnons in a -ter Ordnung die Zustände (3.67) mit $l = 1, 2, \dots, a/2$ ein. In diesem Sinn kann das Magnon als

gebundener Zustand zweier Domänenwände angesehen werden.

3.4.4.1 Magnonen als gebundene Zustände

Es soll die Frage diskutiert werden, ob Magnonen als gebundene Zustände in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda < \lambda_c$ existieren. Zu diesem Zweck werden in den Abbildungen (3.13) und (3.14) die niedrigsten Magnonmoden mit 2-Domänenwandkontinua für die Spinwerte $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ im $S_{tot}^z = 1$ Unterraum verglichen. Die Magnonmoden wurden durch $[8, 8]_{\omega_S(0)}$ genähert. Die Energien der Kontinuumszustände wurden jeweils durch Summation der einzelnen Approximanden für die Anregungsenergien gebildet, d.h. Wechselwirkungseffekte wurden vernachlässigt. Dabei wurden für die Domänenwände die in den Legenden von Abbildung (3.10) aufgeführten Approximanden verwendet. Die oberen Ränder der Kontinua werden nicht betrachtet, da die Extrapolationen der höherenergetischen Domänenwandmoden problematisch sind.

Das $S = 1/2$ Modell unterscheidet sich von den Systemen mit $S > 1/2$ offensichtlich durch das Fehlen eines gebundenen Zustands in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda < 1$. Somit wird das niederenergetische Verhalten der $S = 1/2$ Kette in der Néel-Phase durch Paare elementarer Domänenwandanregungen bestimmt. Im Gegensatz dazu stellt die Spinwelle in den Unterräumen $|S_{tot}^z| = 1$ die elementare Anregung für $S > 1/2$ im Intervall $0 \leq \lambda \ll \lambda_c$ dar. In der Umgebung des kritischen Punktes nähert sich die Kurve der $\omega_S(0)$ Mode des Magnons dem Kontinuum in den Abbildungen (3.13) und (3.14) an, d.h. die Bindungsenergie der beiden Domänenwände verringert sich.

$S = 1$ xxz-Modell: Die niedrigste Magnonmode schneidet die niedrigste Kontinuumsmode am kritischen Punkt (innerhalb der Fehlergrenzen). Aus diesem Grund existiert das Magnon als gebundener Zustand in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda \lesssim 0.84$. Am kritischen Punkt kondensieren die SZD's, der Grundzustand der Néel-Phase wird instabil und das Magnon existiert nicht mehr als Anregung über dem Néel-Grundzustand.

$S = 3/2$ xxz-Modell: Analog zum Fall des $S = 1$ Systems existiert das Magnon als gebundener Zustand in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda \lesssim 1$ (innerhalb der Fehlergrenzen). Die Frage nach der Soft-Mode ist ungeklärt, es ist lediglich zu beobachten, daß die Anregungsenergie des Zustands $|\text{DW}^-; k = \pi/2, S_{tot, \text{odd}}^z = 1/2\rangle$ im gesamten Intervall $0 \leq \lambda \lesssim 1$ unter der des Zustands $|\text{DW}; k = \pi/2, S_{tot, \text{odd}}^z = 3/2\rangle$ verläuft.

$S = 2$ xxz-Modell: Der Fall der $S = 2$ Kette ist mit dem des $S = 1$ Systems vergleichbar: Die Spinwelle existiert als gebundener Zustand eines SZD's und einer Domänenwand, die durch die S^z -Projektion $m = 1$ am Übergangplatz zwischen den beiden Néel-Zustände charakterisiert ist, in der gesamten Néel-Phase $0 \leq \lambda \lesssim 0.96$. Die Soft-Mode des Systems

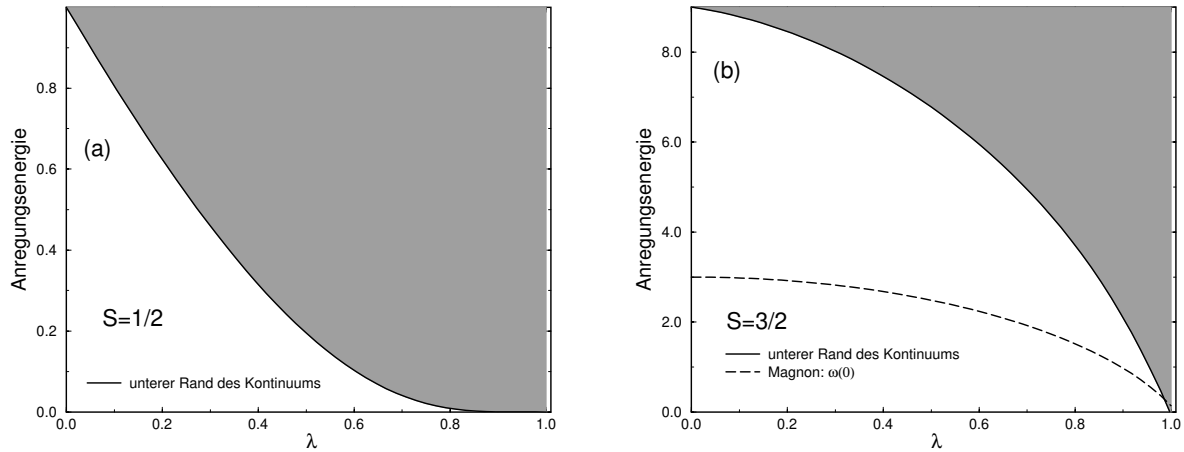


Abbildung 3.13: $S_{tot}^z = 1$ Unterraum: (a) $S = 1/2$: 2-Domänenwandkontinuum gemäß (3.8). (b) $S = 3/2$: Die $\omega_{S=3/2}(0)$ Magnonmode unter dem durch $S_{tot}^z = 3/2 - 1/2$ definierten Kontinuum.

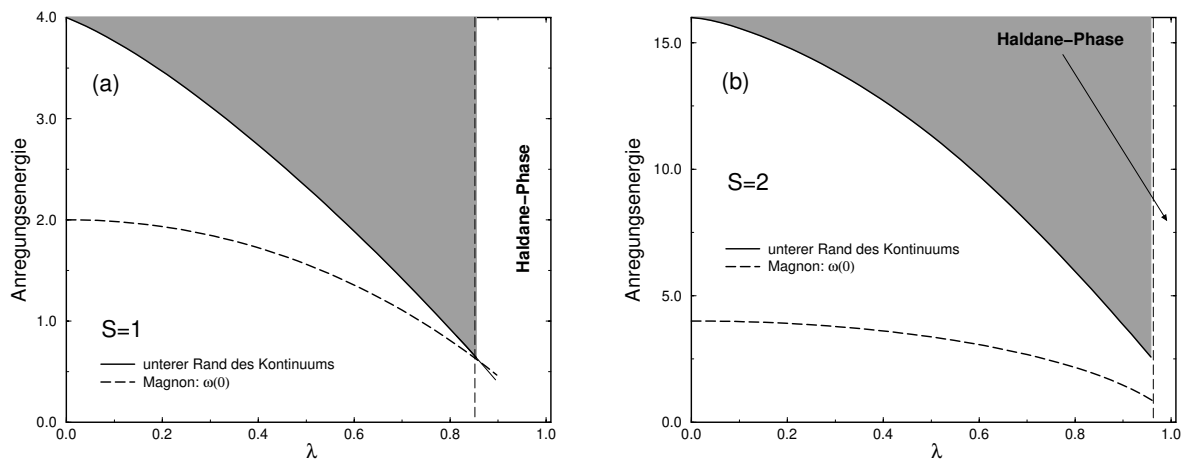


Abbildung 3.14: $S_{tot}^z = 1$ Unterraum: Die niedrigste Magnonmode im Vergleich zum 2-Domänenwandkontinuum. Sowohl für $S = 1$ als auch für $S = 2$ wurde das durch $S_{tot}^z = 1 + 0$ definierte Kontinuum betrachtet.

ist der SZD. In Abbildung (3.14) ist jedoch augenfällig, daß die Kurve der Magnonmode $\omega_{S=2}(0)$ die Kurve der niedrigsten Kontinuumsmode nicht am kritischen Punkt schneidet. Dies könnte folgende Gründe haben: Einerseits ist $\lambda_c \approx 0.96$, $S = 2$ lediglich eine Abschätzung für die untere Grenze des kritischen Punktes, andererseits weisen die Approximanden der Zustände $|\text{DW}^\pm; k = 0, S_{tot, \text{odd}}^z = 1\rangle$ in der Umgebung des kritischen Punktes große Abweichungen voneinander auf.

Abschließend sei bemerkt, daß es neben den in Abbildung (3.13) und (3.14) dargestellten Kontinua sowohl für $S = 3/2$ als auch für $S = 2$ weitere 2-Domänenwandkontinua gibt:

- $S = 3/2$: $S_{tot}^z = 3/2 - 1/2$ (Abbildung (3.13)) und $S_{tot}^z = 1/2 + 1/2$.
- $S = 2$: $S_{tot}^z = 1 + 0$ (Abbildung (3.14)) und $S = 2 - 1$.

Die Untersuchung der Kontinua $S_{tot}^z = 1/2 + 1/2$ für $S = 3/2$ und $S_{tot}^z = 2 - 1$ für $S = 2$ führt jedoch auf keine neuen Resultate.

3.4.4.2 Crossover in Ketten mit ganzzahligem Spin

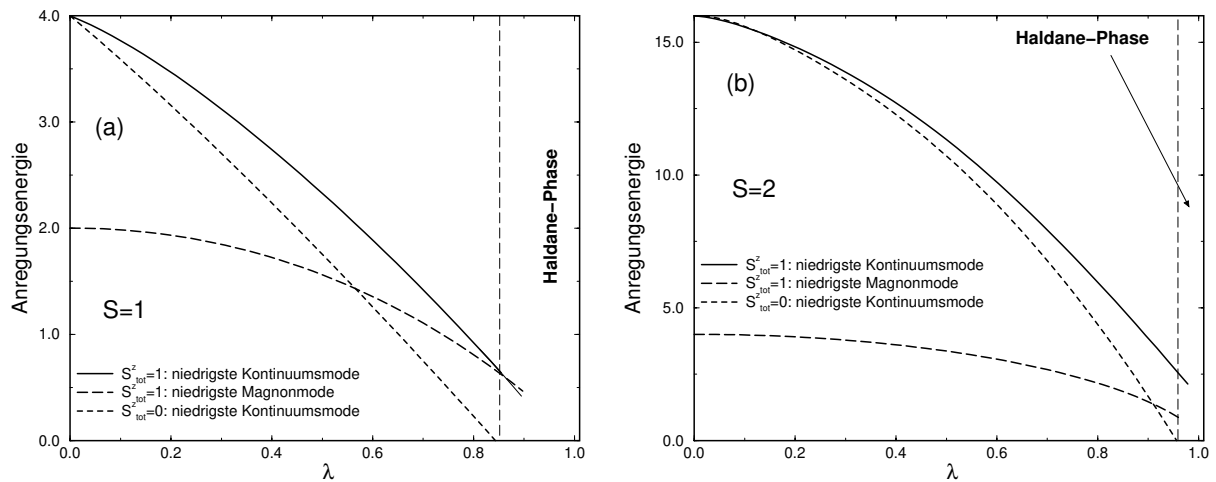


Abbildung 3.15: Die niedrigste Magnonmode im $S_{tot}^z = 1$ Unterraum im Vergleich mit den niedrigsten Moden der durch $S_{tot}^z = 0 + 0$ und $S_{tot}^z = 1 + 0$ definierten Kontinua für (a) $S = 1$, (b) $S = 2$.

Betrachtet man zusätzlich zu den Unterräumen $|S_{tot}^z| = 1$ die Anregungen im Unterraum $S_{tot}^z = 0$ in Ketten mit einer geraden Anzahl von Gitterplätzen, so ergibt sich in Systemen mit ganzzahligem Spin ein Crossover: Die niedrigste Mode des Kontinuums $S_{tot}^z = 0 + 0$,

welches im $S_{tot}^z = 0$ Unterraum aus den Anregungsenergien zweier SZD's gebildet wird, schneidet die niedrigste Magnonmode $\omega_S(0)$ an dem Punkt λ_{cross} ($\lambda_{cross} < \lambda_c$). Im Intervall $0 \leq \lambda < \lambda_{cross}$ ist die niedrigste Anregung durch das Magnon gegeben. Im Intervall $\lambda_{cross} < \lambda < \lambda_c$ stellen SZD's im $S_{tot}^z = 0$ Unterraum die elementaren Anregungen dar.

Abbildung (3.15) illustriert dieses Verhalten für die Systeme mit $S = 1, 2$. Analog zu (3.4.4.1) wurden die Magnonmoden durch $[8, 8]_{\omega_S(0)}$ genähert. Die Energien der Kontinuumszustände wurden jeweils durch Summation der einzelnen Approximanden gebildet (s. Legende in Abbildung (3.10)). Im Fall des $S = 1$ Systems ergibt sich $\lambda_{cross} \approx 0.57$, für die $S = 2$ Kette verschiebt sich dieser Wert in Richtung des isotropen Punktes zu $\lambda_{cross} \approx 0.91$. Dieser Crossover-Effekt existiert ausschließlich in Modellen mit ganzzahligem Spin, da die $\omega_S(0)$ Mode des Magnons dieser Systeme am kritischen Punkt λ_c eine endliche Anregungslücke aufweist. Im Gegensatz dazu verschwindet die Magnonmode $\omega_{3/2}(0)$ am kritischen Punkt $\lambda_c \approx 1$ für das $S = 3/2$ Modell.

KAPITEL 4

$S = 1/2$ Zick-Zack-Ketten

In diesem Kapitel werden elementare Anregungen im eindimensionalen $S = 1/2$ Heisenberg-Modell mit antiferromagnetischer, alternierender nächster-Nachbar-Wechselwirkung (nn) und antiferromagnetischer übernächster-Nachbar-Wechselwirkung (nnn) untersucht. Diese Wechselwirkungen sind schematisch in Abbildung (4.1) dargestellt. Dieses als Zick-

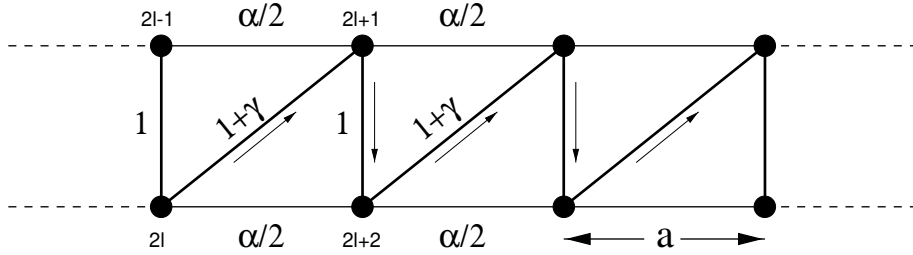


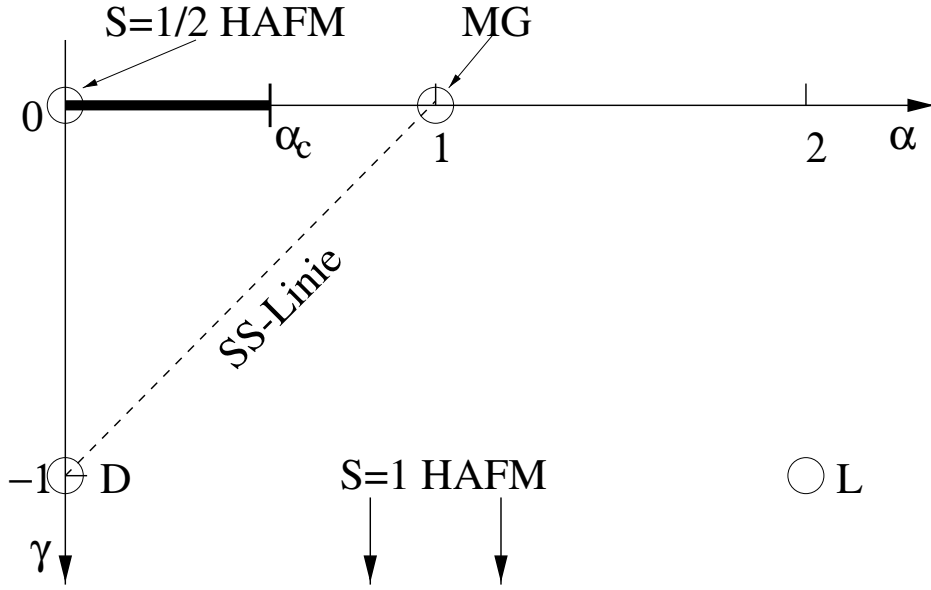
Abbildung 4.1: Wechselwirkungen der $S = 1/2$ Zick-Zack-Kette. Die Pfeile verdeutlichen die Kettenrichtung.

Zack-Kette oder verallgemeinerte Spinleiter bezeichnete Modell wird durch den SU(2)-invarianten Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
 H &= H^{rung} + (1 + \gamma)H^{diag} + \frac{\alpha}{2}H^{leg} \quad (4.1) \\
 H^{rung} &= \sum_{l=1}^L \vec{S}_{2l-1} \vec{S}_{2l} & H^{diag} &= \sum_{l=1}^L \vec{S}_{2l} \vec{S}_{2l+1} \\
 H^{leg} &= \sum_{l=1}^L \left[\vec{S}_{2l-1} \vec{S}_{2l+1} + \vec{S}_{2l} \vec{S}_{2l+2} \right]
 \end{aligned}$$

beschrieben [18], [72], [73], [74]. In Analogie zu den vorherigen Kapiteln wird die Energie in Einheiten des Austauschintegrals der Sprossenwechselwirkung angegeben. Es werden periodische Randbedingungen verwendet. Die Einheitszelle besteht aus zwei Spins. Für die in Abbildung (4.1) definierte Gitterkonstante soll $a \rightarrow 1$ gelten. N bezeichnet die Anzahl der Spins, $L = N/2$ die Anzahl der Einheitszellen. Im folgenden numeriert der Index $l = 1, \dots, L$ die Sprossen, $l' = 1, \dots, L$ bezeichnet die Diagonalen in Abbildung (4.1). Das durch die Parameter α, γ aufgespannte Phasendiagramm ist in Abbildung (4.2) dargestellt. Die obere Halbebene des Phasendiagramms $\gamma > 0$ ist mit dem Streifen $-1 < \gamma < 0$ durch die Transformation

$$\gamma \rightarrow -\frac{\gamma}{1 + \gamma}, \quad \alpha \rightarrow -\frac{\alpha}{1 + \gamma} \quad (4.2)$$

Abbildung 4.2: Phasendiagramm der $S = 1/2$ Zick-Zack-Kette.

verbunden. Auf der Linie ($\alpha \leq \alpha_c, \gamma = 0$), $\alpha_c \approx 0.4822$ ist das System kritisch, im verbleibenden Bereich des Phasendiagramms ($\alpha > 0$) ist die Zick-Zack-Kette durch einen ungeordneten Grundzustand (Spinflüssigkeit) und eine endliche Anregungslücke charakterisiert. Der Phasenübergang von der Spinflüssigkeitsphase auf die kritische Linie ist ein Übergang 2-ter Ordnung und durch eine exponentiell divergierende Korrelationslänge charakterisiert [19], [20], [75], [76]. Folgende Punkte (α, γ) des Phasendiagramms seien hervorgehoben:

- $(0, 0)$: $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagnet (HAFM). Der eindeutige Grundzustand ist ein Singlett mit algebraisch zerfallenden räumlichen Korrelationsfunktionen. Elementare Anregungen sind $S_{tot} = 1/2$ Spinonen, die nur in Paaren auftreten (vgl. Kapitel 3).
- $(1, 0)$: Majumdar-Ghosh-Modell (MG) [14]. Dieses VBS-Modell hat die beiden entarteten Grundzustände:

$$\begin{aligned}
 |0_r\rangle &= \prod_{l=1}^L |s\rangle_l \quad \text{und} \quad |0_d\rangle = \prod_{l'=1}^L |s\rangle_{l'} & (4.3) \\
 |s\rangle_l &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2l-1}\downarrow_{2l}\rangle - |\downarrow_{2l-1}\uparrow_{2l}\rangle) \\
 |s\rangle_{l'} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2l'}\downarrow_{2l'+1}\rangle - |\downarrow_{2l'}\uparrow_{2l'+1}\rangle)
 \end{aligned}$$

Die von Shastry und Sutherland eingeführten Kinks (SS-Kinks) sind eine sehr gute Näherung für die elementaren Anregungen [25]. Ein Kink ist als freier Spin zwischen

den beiden Grundzuständen des MG-Modells definiert (vgl. Abbildung (4.3,a.)). Diese Soliton-artigen Zustände sind durch $S_{tot} = 1/2$ charakterisiert und können nur in Paaren auftreten.

- $(0, -1)$: Dimer-Modell (D). Die Sprossen der Leiter sind entkoppelt, der Grundzustand ist trivialerweise ein Produkt aus Sprossen-Singletts. Anregungen ergeben sich durch das Ersetzen eines Sprossen-Singletts durch ein Triplet.
- $(0 \leq \alpha < 1, \gamma = \alpha - 1)$: Sutherland-Shastry-Linie (SS-Linie). Einer der beiden Grundzustände des MG-Modells $|0_r\rangle$ ist eindeutiger Grundzustand auf der gesamten SS-Linie. Am MG-Punkt findet ein Phasenübergang 1-ter Ordnung (Crossover) statt.
- $(-1, 2)$: Spinleiter (L). Dieses Modell wurde aufgrund seiner experimentellen Relevanz intensiv untersucht [77], [78], [79], [80], [81], [82]. Ein Übersichtsartikel sowie eine ausführliche Referenzenliste befinden sich in [15]. Der eindeutige Grundzustand ist ein Singlett (Lieb-Mattis-Theorem). Als elementare Anregung findet man ein Triplet. Die Dispersionsrelation stimmt qualitativ mit der des $S = 1$ Haldane-Tripletts überein, wobei die Anregungslücke der Leiter größer als die des Haldane-Tripletts ist (siehe z.B. Abbildung 4 in [73]).
- $(\alpha = konst., \gamma \rightarrow -\infty)$: Die Singletts auf den Diagonalen liegen energetisch unendlich hoch, das System wird zum $S = 1$ HAFM. Elementare Anregung ist das Haldane-Triplet.

Ziel dieses Kapitels ist die Formulierung einer Variationswellenfunktion, welche die elementaren Anregungen in dem nichtkritischen Bereich des α - γ -Phasendiagramms qualitativ korrekt wiedergibt. Es soll der Zusammenhang zwischen den SS-Kinks, dem Leiter-Triplett und dem Haldane-Triplett untersucht werden [84].

Im ersten Abschnitt werden Matrix-Produkt-Wellenfunktionen (MP) [85], [86] für den Grundzustand und für die elementare Anregung konstruiert. Es wird die Berechnung von Erwartungswerten erläutert (s. Anhang D). Die Diskussion der Energieerwartungswerte ist Thema des zweiten und dritten Abschnitts. Die Ergebnisse der Variationsrechnungen werden mit von U. Neugebauer berechneten Lanczos-Daten aus [73] und [83] verglichen.

4.1 Matrix-Produkt-Variationswellenfunktionen

4.1.1 Grundzustand

Zunächst soll eine Variationswellenfunktion für den Grundzustand konstruiert werden. Den Ausgangspunkt bildet das MG-Modell. Die beiden Grundzustände können folgendermaßen als MP-Wellenfunktion dargestellt werden [73]:

$$|0_d\rangle = \text{Tr} \left[\prod_{l'=1}^L g_{l'}^{(\text{MG1})} \right], \quad g_{l'}^{(\text{MG1})} = \begin{pmatrix} |s\rangle_{l'} & 0 \\ 0 & |s\rangle_{l'} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

$$|0_r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{Tr} \left[\prod_{l'=1}^L g_{l'}^{(\text{MG2})} \right], \quad g_{l'}^{(\text{MG2})} = \begin{pmatrix} |\uparrow\downarrow\rangle_{l'} & -|\uparrow\uparrow\rangle_{l'} \\ |\downarrow\downarrow\rangle_{l'} & -|\downarrow\uparrow\rangle_{l'} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Im Fall von (4.4) handelt es sich offensichtlich um eine Singlett-Produkt-Wellenfunktion. Mittels vollständiger Induktion kann gezeigt werden, daß (4.5) eine Darstellung der Singlett-Produkt-Wellenfunktion $|0_r\rangle$ ist. Die Spurbildung in (4.4) und (4.5) führt auf Eigenzustände zum Translationsoperator, der aufgrund der periodischen Randbedingungen mit dem Hamilton-Operator vertauscht. Es kann gezeigt werden, daß (4.4) und (4.5) Spezialfälle der einparametrischen Familie

$$|\psi(u)\rangle = \text{Tr} \left[\prod_{l'=1}^L g_{l'} \right], \quad g_{l'} = \begin{pmatrix} a|t_0\rangle_{l'} + b|s\rangle_{l'} & -a\sqrt{2}|t_+\rangle_{l'} \\ a\sqrt{2}|t_-\rangle_{l'} & -a|t_0\rangle_{l'} + b|s\rangle_{l'} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

von Singlett-MP-Wellenfunktionen mit $u = a/b$ sind [32]. Die Triplets in (4.6) sind durch

$$|t_+\rangle_{l'} = |\uparrow_{2l'}\uparrow_{2l'+1}\rangle, \quad |t_-\rangle_{l'} = |\downarrow_{2l'}\downarrow_{2l'+1}\rangle, \quad (4.7)$$

$$|t_0\rangle_{l'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2l'}\downarrow_{2l'+1}\rangle + |\downarrow_{2l'}\uparrow_{2l'+1}\rangle) \quad (4.8)$$

definiert. Die Wellenfunktion (4.6) kann als Variationswellenfunktion betrachtet werden, da sie am MG-Punkt ($u = 0, u = 1$) und auf der SS-Linie ($u = 1$) die exakten Grundzustände bzw. den exakten Grundzustand darstellt. Der Variationsparameter ist das Verhältnis $u = a/b$. Die Parameter a, b werden zunächst komplex gewählt, die Minimierung des Energieerwartungswertes führt jedoch auf reelle a, b .

Im Grenzfall $b \rightarrow 0$, der sich für $\gamma \rightarrow -\infty$ ergeben sollte, reduziert sich (4.6) auf den Grundzustand des AKLT-Modells (3.13), [13]. Der AKLT-Grundzustand beschreibt den Grundzustand des $S = 1$ HAFM qualitativ korrekt [52], [87]. Vernachlässigt wird in dieser Näherung eine Störung der verborgenen Ordnung (3.11), was mit dem nichtlokalen String-Order-Parameter (3.12) gemessen werden kann.

Die Wellenfunktion (4.6) weist ebenfalls verborgene Ordnung auf. Die Verallgemeinerung des Ordnungsparameters auf Leitersysteme wurde in [18], [88], [73] betrachtet. Die entsprechende Verallgemeinerung der Kennedy-Tasaki-Transformation wurde von Takada und

Watanabe konstruiert [89], [90]. Die Wellenfunktion (4.6) wird durch diese Transformation in eine Summe von Produktwellenfunktionen transformiert.

Die Norm der Wellenfunktion (4.6) sowie Erwartungswerte können gemäß [86] mit der sogenannten *Transfermatrix*

$$G = g^\dagger \otimes g, \text{ wobei } G_{(i_1, j_1), (i_2, j_2)} = (g_l^\dagger)_{i_1, i_2} (g_l)_{j_1, j_2} \text{ für alle Diagonalen } l', \quad (4.9)$$

berechnet werden. Aus der Normierung

$$\langle \psi(u) | \psi(u) \rangle = \text{Tr} (G^L) = \lambda_1^L + \lambda_2^L + \lambda_3^L + \lambda_4^L \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \lambda_1^L, \quad \lambda_1 < \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 \quad (4.10)$$

ergibt sich die Nebenbedingung

$$\lambda_1 = 3a^2 + b^2 \stackrel{!}{=} 1, \quad (4.11)$$

wobei $\lambda_1, \dots, \lambda_4$ die Eigenwerte der G -Matrix sind. Die Minimierung des Energieerwartungswertes wird in Abschnitt 4.2 diskutiert.

4.1.2 Triplet-Anregung

Da MP-Zustände mit S_{tot} als guter Quantenzahl konstruiert werden können [32], besteht die Möglichkeit, MP-Variationswellenfunktionen für angeregte Zustände zu betrachten. Es soll eine Variationswellenfunktion $|\psi_\mu\rangle$, $\mu = \pm, 0$ für angeregte Triplet-Zustände mit folgenden Eigenschaften konstruiert werden ($\mu = \pm, 0 \hat{=} S_{tot}^z = \pm 1, 0$):

1. Am MG-Punkt soll $|\psi_\mu\rangle$ den Ansatz von Shastry und Sutherland - zwei freie SS-Kinks - reproduzieren.
2. $|\psi_\mu\rangle$ soll die von Caspers und Magnus entdeckte exakte Mode

$$\sum_{l=1}^L (-1)^l |s\rangle_1 |s\rangle_2 \dots |t_\mu\rangle_l \dots |s\rangle_{L-1} |s\rangle_L \quad \mu = \pm, 0 \quad (4.12)$$

auf der SS-Linie enthalten [91].

3. Im Grenzfall $\gamma \rightarrow -\infty$ soll sich die Näherung von Fátth und Sólyom für das Haldane-Triplet ergeben [46], [47]. Bei dieser Näherung handelt es sich um ein Soliton bezüglich der verborgenen Ordnung, das auf folgende Weise als MP-Zustand dargestellt werden kann:

$$|\psi_\mu(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L e^{ikn} \text{Tr} \left[g_1^{(\text{AKLT})} g_2^{(\text{AKLT})} \dots g_{n-1}^{(\text{AKLT})} (\sigma^{(\mu)})^\dagger g_n^{(\text{AKLT})} \dots g_{L-1}^{(\text{AKLT})} g_L^{(\text{AKLT})} \right] \quad (4.13)$$

Dabei ergibt sich $g_l^{(\text{AKLT})}$ aus (4.6) im Grenzfall $b \rightarrow 0$. Die $\sigma^{(\mu)}$ sind die Matrizen

$$\sigma^{(\pm)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma^{(x)} \pm i\sigma^{(y)}) , \quad \sigma^{(0)} = \sigma^{(z)} , \quad (4.14)$$

wobei $\sigma^{(x)}, \sigma^{(y)}, \sigma^{(z)}$ die Pauli-Matrizen sind.

Aus dem ersten Punkt der Aufzählung geht hervor, daß $|\psi_\mu\rangle$ eine 2-Teilchenwellenfunktion sein muß, d.h. Funktion zweier Impulse q_1, q_2 ist. Ausgangspunkt zur Konstruktion von $|\psi_\mu\rangle$ bildet wiederum das MG-Modell. Die in Abbildung (4.3, a.) illustrierte Konfiguration zweier SS-Kinks, die $r = m - n$ ($r \geq 0$) Sprossen voneinander getrennt sind, kann auf folgende Weise als MP-Wellenfunktion dargestellt werden:

$$\text{Tr} \left[\left(\prod_{l'=1}^n g_{l'}^{(\text{MG2})} \right) \sigma^{(-)} \prod_{l'=n+1}^m g_{l'}^{(\text{MG1})} \prod_{l'=m+1}^L g_{l'}^{(\text{MG2})} \right] \quad (4.15)$$

$$= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} |\uparrow\rangle|s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_n^{(r)}|\downarrow\rangle & -|\uparrow\rangle|s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_n^{(r)}|\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle|s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_n^{(r)}|\downarrow\rangle & -|\downarrow\rangle|s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_n^{(r)}|\uparrow\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \right] \quad (4.16)$$

$$\begin{pmatrix} |s\rangle_{n+1}^{(d)} \dots |s\rangle_m^{(d)} & -|s\rangle_{n+1}^{(d)} \dots |s\rangle_m^{(d)} \\ |s\rangle_{n+1}^{(d)} \dots |s\rangle_m^{(d)} & -|s\rangle_{n+1}^{(d)} \dots |s\rangle_m^{(d)} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

$$\begin{pmatrix} |\uparrow\rangle|s\rangle_{m+2}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)}|\downarrow\rangle & -|\uparrow\rangle|s\rangle_{m+2}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)}|\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle|s\rangle_{m+2}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)}|\downarrow\rangle & -|\downarrow\rangle|s\rangle_{m+2}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)}|\uparrow\rangle \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

$$\propto |s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_n^{(r)}|\uparrow\rangle|s\rangle_{n+1}^{(d)} \dots |s\rangle_m^{(d)}|\uparrow\rangle|s\rangle_{m+2}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)} \quad (4.19)$$

Um den Unterschied zwischen Singletts auf Sprossen bzw. Diagonalen hervorzuheben, wurden den Zuständen in (4.16) - (4.19) die Superskripte $(r) \hat{=}$ (Sprosse) und $(d) \hat{=}$ (Diagonale) hinzugefügt.

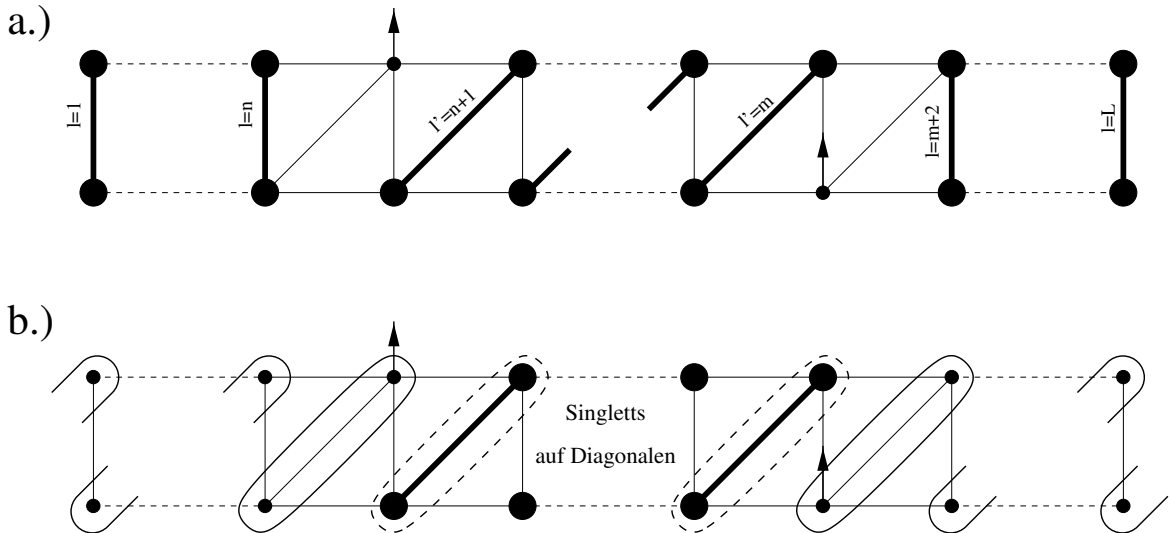


Abbildung 4.3: a.) Darstellung zweier SS-Kinks zwischen den beiden MG-Grundzuständen. Der Index l nummeriert die Sprossen, der Index l' die Diagonalen. Die hervorgehobenen Sprossen/Diagonalen symbolisieren Singletts. b.) Schematische Darstellung der Zustände $|n, m, +\rangle$ in (4.22). Ovale mit durchgezogenen Linien symbolisieren g_l , Ovale mit gestrichelten Linien entsprechen $g_l^{(\text{MG1})}$

Bewegt man sich im Phasendiagramm (4.2) vom MG-Punkt auf der SS-Linie in Richtung des D-Punktes, so bleibt $|0_r\rangle$ Grundzustand des Modells. Der Energieerwartungswert

vom Zustand $|0_d\rangle$, der kein Eigenzustand auf der SS-Linie ist, steigt proportional zur Systemgröße. Aus diesem Grund können die beiden SS-Kinks keinen Streuzustand auf Linie ($0 \leq \alpha < 1$, $\gamma = \alpha - 1$) bilden. Es ist zu erwarten, daß die beiden Kinks auf der SS-Linie einen gebundenen Zustand mit α -abhängiger Lokalisierung $\xi(\alpha)$ formen. Der Begriff Lokalisierung bezeichnet in diesem Kapitel die charakteristische Entfernung (Bindungslänge) zweier gebundener Kinks. Am D-Punkt muß diese Lokalisierung maximal werden, d.h. $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \xi(\alpha) = 0$, da die Spins, die das Triplet bilden, auf eine Sprosse beschränkt sind:

$$\begin{aligned} & |s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_{n-1}^{(r)} |\uparrow\rangle |s\rangle_n^{(d)} \dots |s\rangle_{n+r-1}^{(d)} |\uparrow\rangle |s\rangle_{n+r+1}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)} \\ & \xrightarrow{(\alpha \rightarrow 0, \gamma = \alpha - 1)} |s\rangle_1^{(r)} \dots |s\rangle_{n-1}^{(r)} |t_+\rangle_n^{(r)} |s\rangle_{n+1}^{(r)} \dots |s\rangle_L^{(r)} \end{aligned}$$

Indem man $\xi(\alpha)$ als Variationsparameter betrachtet, kann man auf der SS-Linie folgende Triplet-Wellenfunktion konstruieren:

$$|\psi_\mu(k, q)\rangle = \sum_{m>n} e^{i[k(m+n)/2 + q(m-n)/2] - (m-n)/\xi} |n, m; \mu\rangle \quad (4.20)$$

$$|n, m; \mu\rangle_{\text{SS-Linie}} = \text{Tr} \left[\left(\prod_{l'=1}^n g_{l'}^{(\text{MG2})} \right) (\sigma^{(\mu)})^\dagger \prod_{l'=n+1}^m g_{l'}^{(\text{MG1})} \prod_{l'=m+1}^L g_{l'}^{(\text{MG2})} \right] \quad (4.21)$$

Eine Verallgemeinerung von (4.21) auf das gesamte Phasendiagramm ohne die kritische Linie ist auf folgende Weise möglich: Der Grundzustand wird durch die Variationswellenfunktion (4.6) mit $u = u_{\min}(\alpha, \gamma)$ beschrieben, d.h. $g_{l'}^{(\text{MG1})} \rightarrow g_{l'}$ für $l' < n$ und $l' > m$ in (4.21). Zur Bestimmung des Teils der Wellenfunktion zwischen den beiden Kinks sei folgende Eigenschaft des Grundzustandsenergieerwartungswertes, der im nächsten Abschnitt diskutiert wird, vorweggenommen: $E_0(u)$ besitzt im Intervall $-\infty < u < \infty$, $\alpha > -\gamma$ zwei Minima. Eines der Minima $u = u_{\min}(\alpha, \gamma) > 0$ ist globales Minimum. Das andere Minimum $u = 0 \forall \alpha, \gamma$ entspricht dem MG-Grundzustand $|0_d\rangle$. Der Zustand zwischen den Kinks soll dem Minimum $u = 0$ entsprechend durch Singlets auf den Diagonalen beschrieben werden. Somit ergibt sich folgender allgemeiner Ansatz für $|n, m; \mu\rangle$:

$$|n, m; \mu\rangle = \text{Tr} \left[\left(\prod_{l'=1}^n g_{l'} \right) (\sigma^{(\mu)})^\dagger \prod_{l'=n+1}^m g_{l'}^{(\text{MG1})} \prod_{l'=m+1}^L g_{l'} \right], \quad u = u_{\min}(\alpha, \gamma) \quad (4.22)$$

Die Zustände (4.22) sind schematisch in Abbildung (4.3) dargestellt. Der 2-Kink-Ansatz (4.20), (4.22) ist ein Triplet und erfüllt die geforderten Voraussetzungen.

Die Berechnung des Erwartungswertes

$$\omega(k, q, \xi) = \frac{\langle \psi_\mu(k, q) | H - E_0(u_{\min}) | \psi_\mu(k, q) \rangle}{\langle \psi_\mu(k, q) | \psi_\mu(k, q) \rangle} \quad (4.23)$$

wird in Anhang D erläutert. Die Diskussion von aus (4.23) resultierenden Dispersionsrelationen sowie die Eigenschaften des Variationsparameters $\xi = \xi(k)$ sind Thema des letzten Abschnitts.

4.2 Grundzustandserwartungswerte

Da die Variationswellenfunktion des Grundzustands (4.6) auch Teil des Ansatzes der elementaren Anregungen in (4.20),(4.22) ist, muß man notwendigerweise untersuchen, in welchen Bereichen des Phasendiagramms der Ansatz (4.6) den Grundzustand quantitativ/qualitativ korrekt beschreibt. Zu diesem Zweck werden in diesem Abschnitt Grundzustandserwartungswerte der Energie und der Korrelationen untersucht. Mit der in (4.9) definierten Transfermatrix G ergibt sich für den Energieerwartungswert:

$$\frac{E_0(a, b)}{L} = \text{Tr} [A G^{L-2}] \quad (4.24)$$

$$= -\frac{3}{4}(1 + \gamma)(b^2 - a^2) + 3a^2(b + a)(b(\alpha - 1) - a(\alpha + 1)), \quad (L \rightarrow \infty)$$

$$\begin{aligned} A_{(i_1, j_1), (i_2, j_2)} &= (g_{i_1}^\dagger g_{i_2}^\dagger)_{i_1, i_2} H_{i_1, i_2} (g_{j_1} g_{j_2})_{j_1, j_2} \\ H_{i_1, i_2} &= \vec{S}_{2n+1} \vec{S}_{2n+2} + (1 + \gamma) \left(\vec{S}_{2n} \vec{S}_{2n+1} + \vec{S}_{2n+2} \vec{S}_{2n+3} \right) \\ &+ \frac{\alpha}{2} \left(\vec{S}_{2n+1} \vec{S}_{2n+3} + \vec{S}_{2n} \vec{S}_{2n+2} \right) \quad (\text{vgl. Abbildung (4.1)}) \end{aligned} \quad (4.25)$$

Mit der Norm (4.11) als Nebenbedingung ergeben sich die Relationen

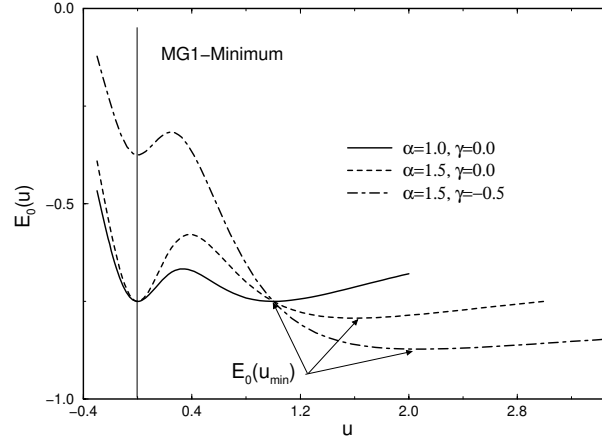
$$a = \frac{u}{\sqrt{1 + 3u^2}}, \quad b = \frac{1}{\sqrt{1 + 3u^2}}. \quad (4.26)$$

Aus (4.24) und (4.26) folgt die zu minimierende Funktion $E_0(u)$. Das globale Minimum $E_0(u_{min})$ dieser Funktion kann als Nullstelle eines Polynoms 3-ter Ordnung analytisch berechnet werden. Wie im letzten Abschnitt vorweggenommen, hat $E_0(u)$ auf der reellen Achse für $\alpha > -\gamma$ neben dem globalen Minimum ein weiteres Minimum. Dieses liegt bei $u = 0$, was dem Zustand $|0_d\rangle$ entspricht. Abbildung (4.4) illustriert diese Eigenschaft anhand dreier Beispiele. Weiterhin ist zu erkennen, daß die zweifache Grundzustandsentartung auf der Linie ($\alpha > \alpha_c, \gamma = 0$) ausschließlich am MG-Punkt $E_0(u_{min}) = E_0(0)$ korrekt beschrieben wird.

In Abbildung (4.5, links) ist $E_0(u_{min})$ für die Linien ($0 \leq \alpha \leq 2, \gamma = 0$) und ($0 \leq \alpha \leq 2, \gamma = -1$) aufgetragen. Im Fall einer homogenen nn-Wechselwirkung ($\gamma = 0$) hat $E_0(u_{min})$ ein Maximum am MG-Punkt. Dies stimmt mit der Grundzustandsenergie der von Zeng und Parkinson formulierten RVB-Wellenfunktion [92], die am MG-Punkt ebenfalls exakt ist, überein. Im Intervall $\alpha > 0$ gilt $E_0^{(MP)} > E_0^{(RVB)}$, andererseits ergibt sich $E_0^{(MP)} < E_0^{(RVB)}$ für den Fall $\alpha < 0$.

Auf der Linie ($0 \leq \alpha \leq 2, \gamma = -1$) wird $E_0(u_{min})$ mit extrapolierten ($L \rightarrow \infty$) Lanczos-Daten aus [73] verglichen. Am D-Punkt liefert der Variationsansatz die exakte Grundzustandsenergie, mit zunehmendem α wird die Variationsenergie schlechter.

Für das Leitermodell liegt $E_0(u_{min})/L \approx -1.102$ ca. 5% über dem (numerisch) exakten Wert $E_0/L \approx -1.156$. Für dieses Modell ist der Wert der MP-Wellenfunktion vergleichbar mit der Grundzustandsenergie $E_0^{(RVB)}/L \approx -1.112$ einer weiteren von Fan und Ma [93] konstruierten RVB-Variationswellenfunktion.

Abbildung 4.4: Beispiele für die Minima des Erwartungswertes $E_0(u)$.

Die Korrelationsfunktionen

$$\langle S_n^x S_{n+r}^x \rangle = \langle S_n^y S_{n+r}^y \rangle = \langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle \propto a^2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r \propto (-1)^\nu e^{-r/\xi} \quad (4.27)$$

$$\xi^{-1} = \ln \left(\frac{1 + 3u_{min}^2}{|1 - u_{min}^2|} \right), \quad \nu = \begin{cases} 0, & \alpha > 1 + \gamma \\ 1, & 0 \leq \alpha \leq 1 + \gamma \end{cases} \quad (4.28)$$

können ebenfalls mit dem Transfermatrixformalismus berechnet werden.

Im rechten Teil von Abbildung (4.5) sind die Korrelationslängen der entsprechenden Linien dargestellt. Deutlich zu erkennen ist das Verschwinden von ξ am MG-Punkt: Gemäß (4.28) gilt $\xi \rightarrow 0$ nur für $|0_r\rangle$. Im Fall des MG-Grundzustands $|0_a\rangle$ verschwindet die Korrelationsfunktion wegen des Vorfaktors a^2 . Das Verhalten der von Zeng und Parkinson ermittelten RVB-Korrelationslänge stimmt für $(\alpha > 0, \gamma = 0)$ mit dem MP-Ansatz überein. Für abnehmende alternierende Wechselwirkung $(\alpha < 0, \gamma = 0)$ wächst die MP-Korrelationslänge stärker als die RVB-Korrelationslänge an.

Auf der Linie $(0 \leq \alpha \leq 2, \gamma = -1)$ verschwindet ξ am D-Punkt und steigt monoton mit zunehmendem α .

Am Leiterpunkt wird die exakte Korrelationslänge $\xi \approx 3.19$ durch $\xi^{(MP)} \approx 0.815$ genähert. Der Wert der RVB-Wellenfunktion beträgt $\xi^{(RVB)} \approx 0.238$. Die Unterschätzung der Korrelationslänge durch die MP-Variationswellenfunktion ist ein bekanntes Problem. Nähert man den Grundzustand des $S = 1$ HAFM durch den AKLT-Grundzustand, so unterschätzt man den exakten Wert $\xi \approx 6.2$ durch $\xi^{(MP)} = -1/\ln(3) \approx 0.910$ erheblich.

Abschließend soll der Grenzfall des $S = 1$ HAFM diskutiert werden. Dazu wird die Singlett-Amplitude b in eine Potenzreihe um $-1/(1 + \gamma)$ entwickelt. Die Entwicklungskoeffizienten werden aus den Nullstellen von $dE_0(b)/db = 0$ bestimmt. Auf diese Weise ergeben sich

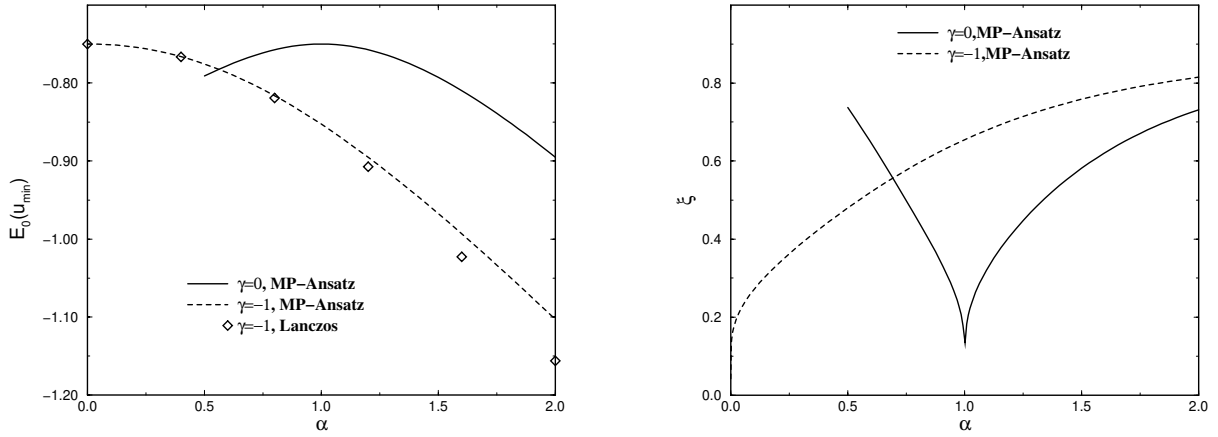


Abbildung 4.5: Links: Variationsenergien $E_0(u_{min})$ im Vergleich mit extrapolierten Lanczos-Daten. Rechts: Korrelationslängen der MP-Variationswellenfunktion.

folgende Potenzreihen für das Singlett-Gewicht b^2 und die Grundzustandsenergie:

$$b^2 = \frac{1}{3(1+\gamma)^2} + \frac{10\alpha - 2}{9(1+\gamma)^3} + \dots \quad (4.29)$$

$$\frac{E_0}{L} = \frac{1+\gamma}{4} - \frac{\alpha+1}{3} + \frac{1}{3(1+\gamma)} + \frac{5\alpha-1}{9(1+\gamma)^2} + \dots \quad (4.30)$$

Offensichtlich gilt $b^2 \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} 0$ in Gleichung (4.29), d.h. die Diagonalen stellen im Grenzfall $\gamma \rightarrow -\infty$ wie erwartet effektive Spins $S = 1$ dar. Die Energie (4.30) entspricht für $\gamma \rightarrow -\infty$ der Näherung der $S = 1$ Grundzustandsenergie durch den Erwartungswert des AKLT-Zustands. Der erste Term in (4.30) beschreibt die Energie der Triplets auf den Diagonalen, der zweite Term läßt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$E_0^{(AKLT)} = -\frac{4}{3}J_{\text{eff}}, \quad J_{\text{eff}} = \frac{\alpha+1}{4}. \quad (4.31)$$

J_{eff} ergibt sich dabei aus der Summe der Wechselwirkungen zweier Triplets auf den Diagonalen.

Die Eigenschaften der MP-Variationswellenfunktion für den Grundzustand lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Der MP-Ansatz kann den Grundzustand in Bereichen kleiner ξ quantitativ korrekt beschreiben. Dies trifft insbesondere in der Umgebung der SS-Linie und des MG-Punktes zu.
- Für zunehmende Werte von α und $\gamma = \text{konst.}$ nimmt die Qualität der Variationswellenfunktion ab.
- Für zunehmende Werte von $-\gamma$ und $\alpha = \text{konst.}$ entspricht der MP-Ansatz (4.6) der Näherung des $S = 1$ Grundzustandes durch den AKLT-Zustand.

4.3 2-Kink-Anregungen

Die Berechnung des Erwartungswertes (4.20), (4.22), die in Anhang D skizziert ist, erfordert mehrere Fallunterscheidungen, da es sich um eine 2-Teilchenwellenfunktion handelt. Der Ausdruck für $\omega(k, q, \xi)$ wurde mittels Computer-Algebra im Limes $L \rightarrow \infty$ berechnet und erstreckt sich über mehrere Seiten. Die Minimierung des Erwartungswertes bezüglich ξ wurde numerisch mit einem Algorithmus aus den *Numerical Recipes* durchgeführt und führt auf eine Funktion $\xi(k)$, die vom Schwerpunktswellenvektor und den Parametern des Hamilton-Operators abhängt. Dabei ergab sich folgende allgemeine Relation:

$$\lim_{k \rightarrow \pi} \xi(k) = 0 \quad \forall \alpha, \gamma \quad (4.32)$$

Abbildung (4.11) stellt den Grenzwert (4.32) anhand zweier Beispiele dar. Der Realteil des Relativimpulses q stellt im Fall gebundener Kinks $\xi < \infty$ einen internen Freiheitsgrad dar. Da es sich hier um einen Variationsansatz handelt, kann keine Quantisierungsbedingung für q gewonnen werden. Es soll daher nur $q = q_{min}$ für die niedrigste Anregungsenergie $\omega(k, q_{min}, \xi) \leq \omega(k, q, \xi)$ betrachtet werden. Die Minimierung bezüglich q führt auf $q_{min} = 0$ im gesamten Phasendiagramm. Die Linie $\gamma = 0$ muß gesondert betrachtet werden, da der Grundzustand für $\alpha > \alpha_c$ zweifach entartet ist. Die 2-Kink-Dispersionsrelation sowie die Lokalisierung ξ soll in folgenden Bereichen des Phasendiagramms untersucht werden:

- Auf der Linie $\gamma = 0$ in der Umgebung des MG-Punktes.
- In der Umgebung der SS-Linie $\alpha \geq \gamma + 1$. Da die niedrigste Mode des MG-Modells zum Wellenvektor $k_0 = 0$, die der Spinleiter jedoch zu $k_0 = \pi$ gehört, muß in dem Bereich $\alpha \geq \gamma + 1$ ein Wechsel des Wellenvektors der niedrigsten Mode $k_0 = 0 \rightarrow \pi$ stattfinden. Dieser Wechsel von k_0 bestimmt einen inkommensurablen Bereich im Phasendiagramm.
- Auf der Linie $(0 \leq \alpha \leq 2, \gamma = -1)$, die Leitermodellen entspricht .

Die Resultate der Variationsrechnung wurden mit Lanczos-Daten für 24 Spins aus [83] verglichen.

4.3.1 Die Linie $\gamma = 0$

Auf der Linie $(\alpha > \alpha_c, \gamma = 0)$ herrscht eine zweifache Grundzustandsentartung. Eine Minimierung von (4.24) führt in diesem Bereich auf einen Grundzustand mit $u_{min} \neq 1$ für $\alpha \neq 1$. Der zweite Grundzustand ergibt sich durch Vertauschen von Sprossen und Diagonalen $2n + 1 \rightarrow 2n - 1 \forall n$ in Abbildung (4.1), da die Transformation (4.2) invariant unter $2n + 1 \rightarrow 2n - 1 \forall n$ ist. Im Rahmen des 2-Kink-Ansatzes (4.20), (4.22) kann jedoch nur einer dieser Grundzustände realisiert werden. Um die zweifache Grundzustandsentartung zu realisieren, wurde daher in (4.22) $u_{min} = 1$ gesetzt. Dieser Ansatz entspricht dem von

Shastry und Sutherland und soll nun auf den MG-Punkt sowie dessen Umgebung angewandt werden.

Die Dispersionsrelation der Streuzustände, welche sich im Grenzfall $\xi \rightarrow \infty$ ergibt, nimmt folgende kompakte Form an:

$$\omega(k, q) = \epsilon\left(\frac{k+q}{2}\right) + \epsilon\left(\frac{k-q}{2}\right) \quad (4.33)$$

$$\epsilon(k^{(\text{Kink})}) = \frac{\alpha}{8}(5 + 4 \cos(k^{(\text{Kink})})) + (1 - \alpha) \left\{ \frac{3}{8} + \frac{4 + 5 \cos(k^{(\text{Kink})})}{5 + 4 \cos(k^{(\text{Kink})})} \right\} \quad (4.34)$$

Die Dispersion eines einzelnen Kinks ist durch (4.34) gegeben. In Abbildung (4.6) sind Streuzustände, gebundene Zustände sowie Lanczos-Daten am MG-Punkt dargestellt. Die

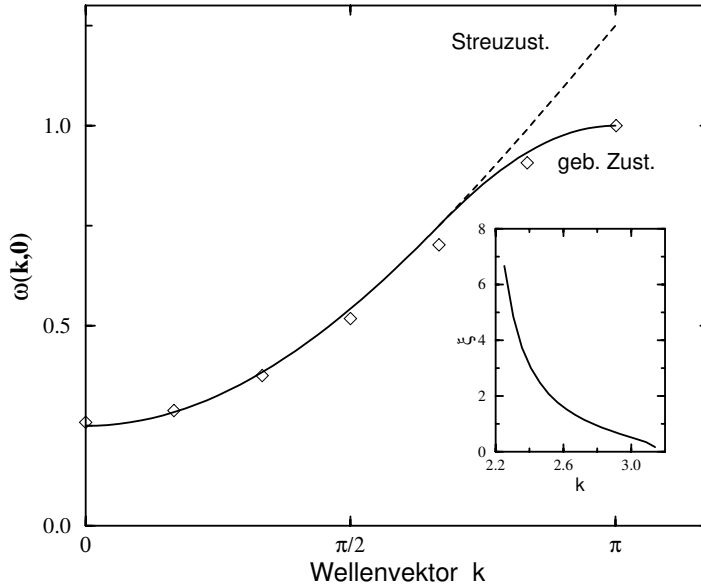


Abbildung 4.6: Streuzustände und gebundene Zustände am MG-Punkt. Die Symbole stellen Lanczos-Daten ($N = 24$) dar. Der Bildeinsatz zeigt die Lokalisierung ξ für die gebundenen Zustände, die im Intervall $0.68 < k \leq \pi$ auftreten.

Minimierung von $\omega(k, 0, \xi)$ führt in Übereinstimmung mit [25] im Intervall $0.68 < k \leq \pi$ auf gebundene Zustände. Die Lokalisierung der gebundenen Zustände ist im Bildeinsatz von Abbildung (4.6) dargestellt. Die zu $\omega(\pi, 0, 0)$ gehörige Anregung entspricht dem exakten Eigenzustand von Caspers und Magnus. Die Lanczos-Daten stimmen sehr gut mit der Energie der Variationsrechnung überein.

An dieser Stelle lassen sich die SS-Kinks des MG-Modells mit den Spinonen des $S = 1/2$ HAFM vergleichen. Sowohl Spinonen als auch SS-Kinks können nur in Paaren auftreten und sind durch $S_{tot} = 1/2$ charakterisiert. SS-Kinks haben im Gegensatz zu Spinonen eine

endliche Anregungslücke. Insbesondere unterscheiden sich SS-Kinks von Spinonen durch die Eigenschaft, gebundene Zustände bilden zu können.

In Abbildung (4.6) sind nur die niedrigsten gebundenen Zustände dargestellt. Es besteht die Möglichkeit, daß weitere gebundene Zustände unter dem Kontinuum existieren [94]. Dies kann mit dem verwendeten Variationsansatz jedoch nicht berechnet werden. Um die

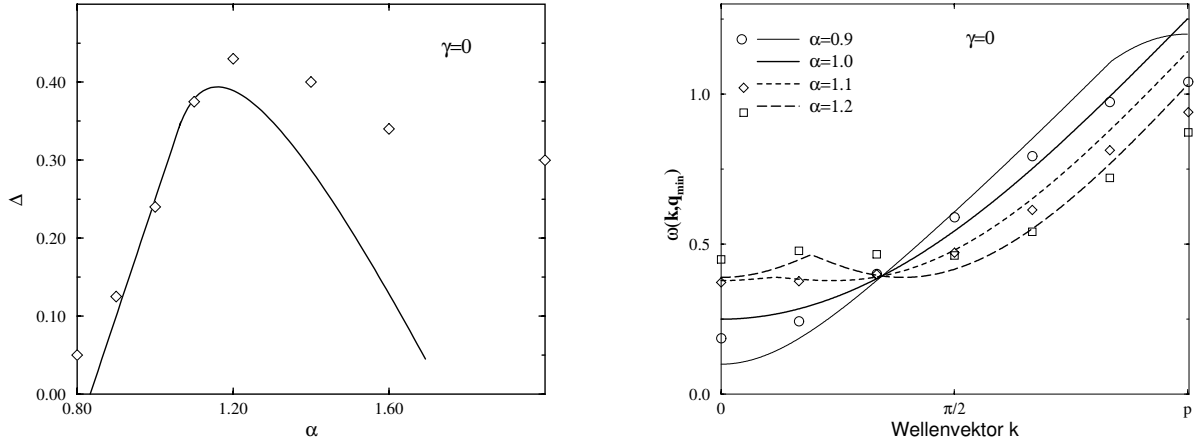


Abbildung 4.7: Links: Die Anregungslücke des 2-Kink-Ansatzes im Vergleich mit DMRG-Daten. Rechts: Dispersionsrelationen im Vergleich mit Lanczos-Daten ($N = 24$).

Gültigkeit des Ansatzes in der Umgebung des MG-Punktes abzuschätzen, wurde die Anregungslücke mit DMRG-Daten aus [74] verglichen, was im linken Teil von Abbildung (4.7) dargestellt ist. Das Maximum der Lücke ist im Vergleich zu den numerischen Daten zu kleineren α verschoben ($\alpha_{\Delta_{max}} = 1/2 + 13/\sqrt{388}$). Die Anregungslücke wird im Intervall $0.85 \lesssim \alpha \lesssim 1.40$ qualitativ korrekt beschrieben.

Bei der Berechnung der Energielücke mit den Formeln (4.33) und (4.34) ist zu bedenken, daß der Wellenvektor der niedrigsten Kontinuumsmode $k_0 = k_0(\alpha)$ eine Funktion des Parameters α ist. Aus der 1-Kink-Dispersion (4.34) ergibt sich für den Wellenvektor der niedrigsten Kink-Mode:

$$\cos(k_0^{(\text{Kink})}) = \begin{cases} -1, & \alpha \leq \frac{18}{17} \\ \frac{3\sqrt{2}}{4} \sqrt{1 - \frac{1}{\alpha} - \frac{5}{4}}, & \alpha > \frac{18}{17} \end{cases} \quad (4.35)$$

Entsprechend folgt für die niedrigste Kontinuumsmode die Existenz zweier Minima: $k_0 = 0$, $q = 2k_0^{(\text{Kink})}$ und $k_0 = 2k_0^{(\text{Kink})}$, $q = 0$. Im rechten Teil von Abbildung (4.7) ist die Entstehung des zweiten Minimums illustriert. In Übereinstimmung damit tritt das zweite Minimum in den numerischen Daten auf.

4.3.2 Der inkommensurable Bereich

Im folgenden wird ausschließlich $q = q_{min} = 0$ betrachtet. Die bezüglich ξ minimierte Dispersionsrelation $\omega(k)$ hängt somit außer von den Parametern α und γ nur noch vom Schwerpunktswellenvektor k ab.

4.3.2.1 SS-Linie

Zunächst soll die 2-Kink-Wellenfunktion entlang der SS-Linie analysiert werden. Für den Wellenvektor der niedrigsten Mode gilt $k_0 = 0$ auf der gesamten SS-Linie. Abbildung (4.8)

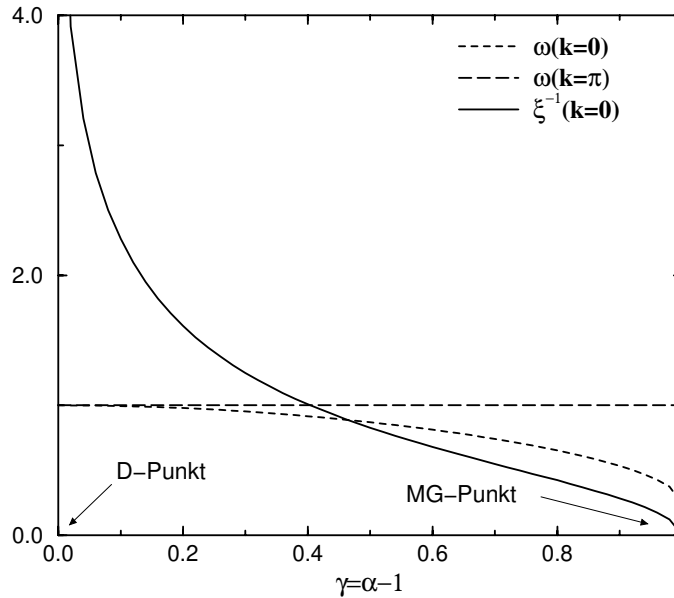


Abbildung 4.8: Bandbreite und Lokalisierung ξ der beiden Kinks auf der SS-Linie.

zeigt neben der Bandbreite $\omega(\pi) - \omega(0)$ den Verlauf der Lokalisierung $\xi(k_0)$. Bereits für beliebig kleine negative γ nimmt $\xi(k_0)$ für alle k einen endlichen Wert an, d.h. es existieren ausschließlich gebundene Zustände. Dies ist verständlich, da eine beliebig kleine Energiedifferenz der MG-Grundzustände $\epsilon = E_0^{\text{MG1}}/L - E_0^{\text{MG2}}/L$ mit einem Faktor L in die Berechnung des Erwartungswertes (4.23), der für $L \rightarrow \infty$ berechnet wurde, eingeht. In der Mitte der SS-Linie $\alpha = -\gamma = 1/2$ ist $\xi(k_0)$ auf die Länge einer Gitterkonstanten a abgesunken. Am D-Punkt sind die Kinks maximal gebunden ($\xi = 0, \forall k$), d.h. sie bilden ein Sprossen-Triplett. Dieses Sprossen-Triplett existiert als exakte Anregung mit dem Wellenvektor $k = \pi$ und Anregungsenergie $\omega(\pi) = 1$ (Caspers und Magnus) auf der gesamten SS-Linie.

Die Bandbreite verschwindet erwartungsgemäß am D-Punkt und wächst, bedingt durch die Energieabsenkung der $\omega(0)$ -Mode, mit zunehmendem ξ . Hieraus läßt sich folgern, daß die

k -abhängige Delokalisierung der beiden Kinks zu einer Energieabsenkung führt.

4.3.2.2 Umgebung der SS-Linie

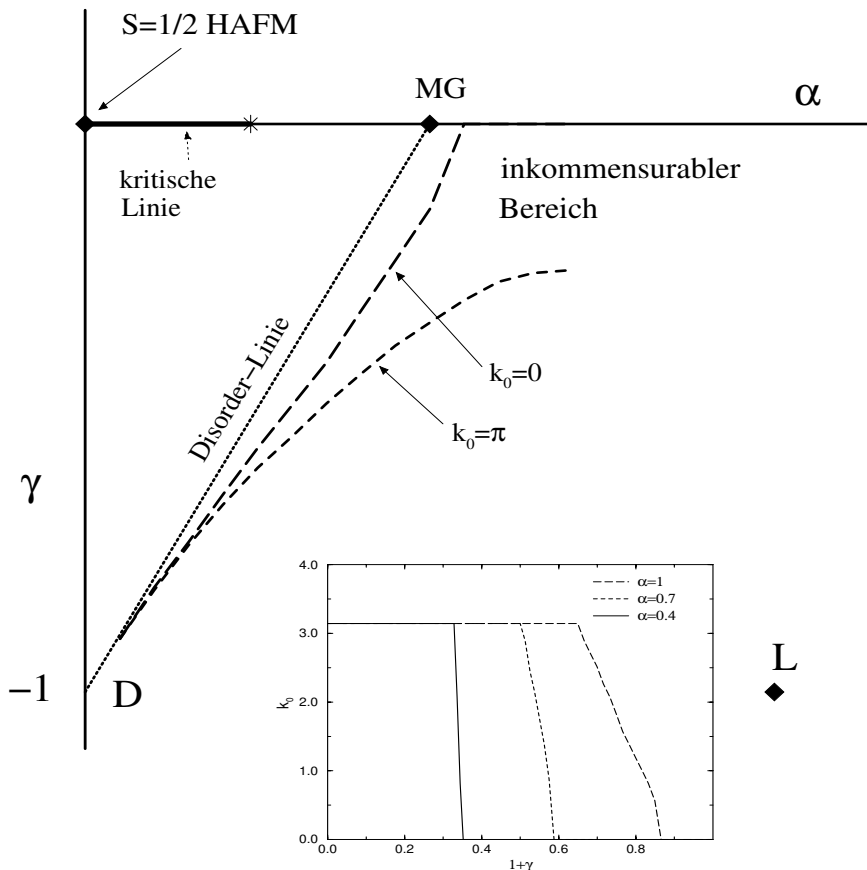


Abbildung 4.9: Das Phasendiagramm mit inkommensurablen Bereich. Der Bildeinsatz zeigt die Verschiebung des Wellenvektors k_0 entlang der Pfade $\alpha = 0.4, 0.7, 1.0$.

Weiterhin soll die Umgebung $\alpha > \gamma + 1$ der SS-Linie untersucht werden. Dazu wurden Dispersionen auf den Pfaden $\alpha = -\gamma$ und $\alpha = 1$ im Phasendiagramm berechnet. In Abbildung (4.10) sind jeweils drei Dispersionen auf diesen Pfaden dargestellt. Anhand dieser Dispersionen ist der Wechsel $k_0 : 0 \rightarrow \pi$ deutlich zu erkennen. Die Variationsenergien sind in guter Übereinstimmung mit den Lanczos-Daten, die durch Symbole in Abbildung (4.10) dargestellt sind. Der Wechsel von k_0 sowie die geringen Bandbreiten inkommensurabler k_0 werden qualitativ korrekt wiedergegeben. Dabei ist es nicht sinnvoll, den Zahlenwert eines inkommensurablen k_0 's mit dem der Lanczos-Daten zu vergleichen, da der numerische Datensatz lediglich aus sieben k -Werten besteht.

Mit den Wellenvektoren k_0 des Variationsansatzes ist es möglich, den gesamten inkommensurablen Bereich im Phasendiagramm zu bestimmen. Zu diesem Zweck wurden Disper-

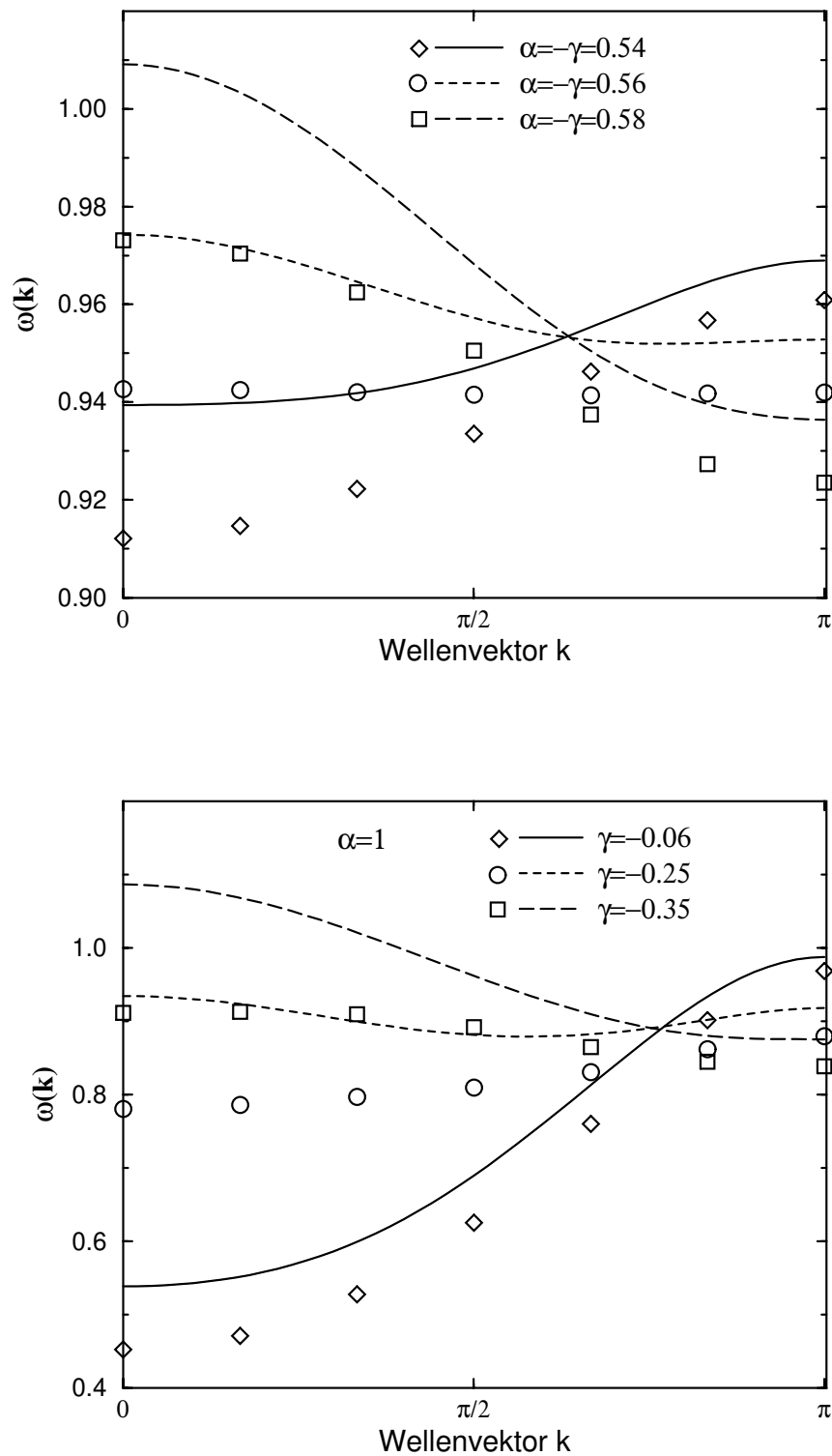


Abbildung 4.10: Dispersionsrelationen auf den Pfaden $\alpha = -\gamma$ (oben) und $\alpha = 1$ (unten). Die Symbole stellen Lanczos-Daten ($N = 24$) dar. Deutlich zu erkennen ist die Verschiebung des Wellenvektors der niedrigsten Mode $k_0 : 0 \rightarrow \pi$ entlang der Pfade.

sionsrelationen entlang von Pfaden $\alpha = konst.$ numerisch minimiert. Der Bildeinsatz in Abbildung (4.9) illustriert den Wechsel von k_0 beim Durchschreiten dieses Bereichs. Die Auswertung aller betrachteten Pfade $\alpha = konst.$ führt auf den in Abbildung (4.9) dargestellten inkommensurablen Bereich.

Disorder-Linien

Das Auftreten inkommensurabler Wellenvektoren hängt eng mit der Existenz sogenannter *Disorder-Punkte* beziehungsweise *Disorder-Linien* im Phasendiagramm zusammen [95], [96], [87]. Diese Punkte (Linien) sind durch das Auftreten räumlich modulierter Korrelationsfunktionen des Grundzustands - $\langle S_n^{(\mu)} S_{n+r}^{(\mu)} \rangle \propto \cos(Qr)f(r)$ - charakterisiert. Die Modulation Q ist inkommensurabel zum Gitter. Es wird angenommen, daß die SS-Linie einschließlich des MG-Punktes eine *Disorder-Linie* ist [92], [97], [72], [74].

Im Fall des MP-Grundzustands (4.6) findet kein kontinuierlicher Wechsel der Modulation $Q : 0 \rightarrow \pi$ statt. Die Modulation springt entsprechend dem Faktor $(-1)^\nu$ in (4.27) auf der SS-Linie von $Q = 0$ auf $Q = \pi$.

Lifshitz-Linien

Der statische Strukturfaktor $S(k)$ ergibt sich aus der Fourier-Transformation der Korrelationsfunktion. Für einen ungeordneten Grundzustand mit räumlich modulierten Korrelationen folgt:

$$S(k) = \sum_r e^{ikr} \langle S_0^z S_r^z \rangle \propto \int_0^\infty dr e^{ikr} \cos(Qr) e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (4.36)$$

$$= \frac{\xi}{2} \left(\frac{1}{1 + \xi^2(k - Q)^2} + \frac{1}{1 + \xi^2(k + Q)^2} \right) \quad (4.37)$$

Es sollen rotationsinvariante Hamilton-Operatoren betrachtet werden, d.h. die Wahl von $\langle S_0^z S_r^z \rangle$ in (4.36) stellt keine Einschränkung dar. Das Maximum des Strukturfaktors $S(k_{peak})$ wechselt für anwachsende Modulationen Q von $k_{peak} = 0$ nach $k_{peak} = \pi$. Das Einsetzen dieses Wechsels bezeichnet man im Phasendiagramm auch als *Lifshitz-Punkt* beziehungsweise *Lifshitz-Linie*. Aus Gleichung (4.37) läßt sich die Position des Maximums in Abhängigkeit von Q und ξ bestimmen. Für das Einsetzen dieses Wechsels ergibt sich folgende Bedingung:

$$(k_{peak})^2 = \frac{1}{\xi^2} \left(2\xi Q \sqrt{1 + \xi^2 Q^2} - (1 + \xi^2 Q^2) \right) \quad (4.38)$$

$$k_{peak} \geq 0 \quad \rightarrow \quad Q \geq \frac{1}{\sqrt{3}\xi} \quad (4.39)$$

Der Wechsel des Strukturfaktormaximums trifft im Phasendiagramm näherungsweise mit dem Wechsel des Minimums der Dispersionsrelation zusammen. Somit liefern die in Abbildung (4.9) berechneten Grenzen des inkommensurablen Bereichs Abschätzungen für die Lifshitz-Linien im Phasendiagramm.

Die Ungleichung (4.39) verdeutlicht, daß Disorder- und Lifshitz-Punkte im allgemeinen nicht miteinander übereinstimmen. Je kleiner die Korrelationslänge des Systems ist, desto weiter sollten Disorder- und Lifshitz-Punkte auseinanderliegen. Dieses Verhalten ist in Abbildung (4.9) zu erkennen: Die $k_0 = 0$ Grenze des inkommensurablen Bereichs, die einer Lifshitz-Linie entspricht, ist im Phasendiagramm deutlich von der Disorder-Linie getrennt. Auf der Linie $\gamma = 0$ ist der MG-Punkt mit $\alpha = 1$ der Disorder-Punkt. Gemäß (4.35) tritt der Lifshitz-Punkt gegenüber dem Disorder-Punkt verschoben bei $\alpha = 18/17$ auf.

4.3.3 Leitermodelle

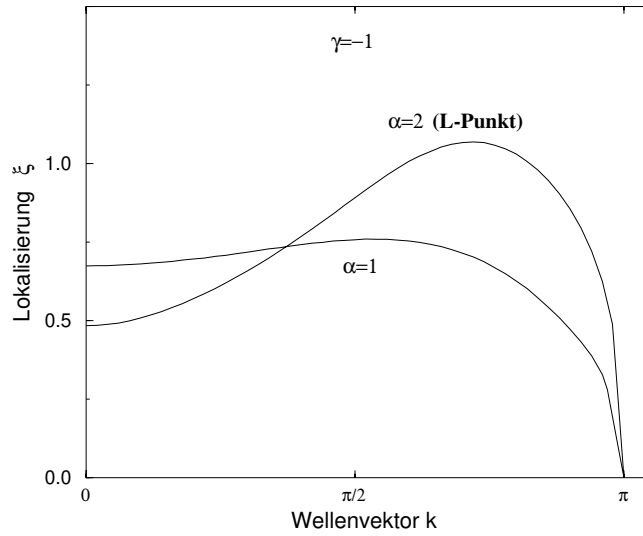


Abbildung 4.11: Die Lokalisierung $\xi(k)$ als Funktion des Wellenvektors zu den Punkten $(1, -1)$ und $(2, -1)$ des Phasendiagramms.

Der im letzten Unterabschnitt diskutierte inkommensurable Bereich wurde durch die Grenzen $k_0 = 0$ und $k_0 = \pi$ festgelegt. Es soll nun das Phasendiagramm unterhalb der $(k_0 = \pi)$ -Grenze, d.h. $\gamma < (k_0 = \pi)$ -Grenze, diskutiert werden. In diesem Sektor des Phasendiagramms ist die Anregungslücke wie beim Haldane-Triplett durch die $k_0 = \pi$ Mode gegeben. Aufgrund der allgemeinen Beziehung (4.32) reduziert sich der 2-Kink-Ansatz für den Wellenvektor $k_0 = \pi$ zu der Einteilchenwellenfunktion

$$|\psi_\mu(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L e^{ikn} \text{Tr} \left[g_1 g_2 \dots g_{n-1} (\sigma^{(\mu)})^\dagger g_n \dots g_{L-1} g_L \right]. \quad (4.40)$$

Für $u \xrightarrow{\gamma \rightarrow -\infty} 0$ entspricht der Ansatz (4.40) der Soliton-Anregung von Fáth und Sólyom [98], [39].

Auf der Linie $\gamma = -1$, die experimentell relevanten Leitermodellen entspricht, soll die Einteilchenanregung (4.40) mit dem 2-Kink-Ansatz verglichen werden. Zu diesem Zweck

wurde die Lokalisation $\xi(k)$ an den Punkten $(1, -1)$ und $(2, -1)$ berechnet und in Abbildung (4.11) dargestellt. Die $\xi(k)$ variieren im Intervall $0 \leq \xi(k) \lesssim 1$, d.h. die beiden Kinks sind stark gebunden. Dementsprechend sollte die Energieabsenkung der 2-Kink-Anregung gegenüber (4.40) gering sein. Abbildung (4.12) zeigt die Dispersionsrelationen der beiden Ansätze für die Leitermodelle $(1, -1)$ und $(2, -1)$ im Vergleich mit numerischen Daten (Lanczos-Daten, $N = 24$). Die Energieabsenkung des 2-Kink-Ansatzes gegenüber der Einteilchenwellenfunktion beträgt maximal 5%. Insbesondere für die niederenergetischen Moden um $k_0 = \pi$ ist der Unterschied vernachlässigbar.

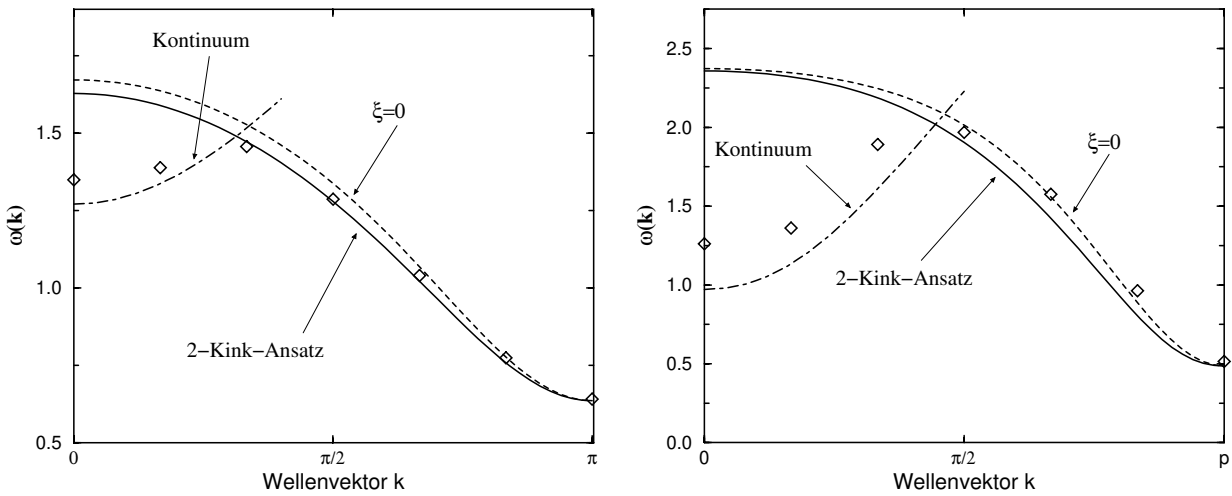


Abbildung 4.12: Der 2-Kink-Ansatz im Vergleich zur Einteilchenanregung (4.40) für die Punkte $(1, -1)$ (links) und $(2, -1)$ (rechts) des Phasendiagramms. Die Symbole stellen die entsprechenden Lanczos-Daten ($N = 24$) dar.

Das Haldane-Triplett ist im Intervall $\pi/2 \lesssim k \leq \pi$ eine einzelne Mode, im Intervall $0 \leq k \lesssim \pi/2$ die untere Grenze eines Kontinuums. Ein analoges Verhalten tritt bei den Leiter-Tripletts auf: Die alternierend gestrichelten Linien in Abbildung (4.12) stellen die Summe zweier Triplett-2-Kink-Anregungen dar. Im Intervall $0 \leq k < \pi/2$ liegt die untere Grenze des Kontinuums energetisch tiefer als die 1-Triplett-Mode. Kontinua mit mehr als zwei Triplets wurden nicht betrachtet. Bedenkt man, daß Finit-Size-Extrapolationen der numerischen Daten nur zu geringen Verschiebungen der Energien führen (die Größe dieser Verschiebungen entspricht ca. der Symbolgröße), so ist eine abstoßende Wechselwirkung zwischen den beiden Triplets für $k = 0$ zu erkennen. Dieses Phänomen wurde ebenfalls im $S = 1$ HAFM beobachtet.

Abschließend soll die Energielücke des MP-Ansatzes entlang der Linie $\gamma = -1$ mit extrapolierten Lanczos-Daten verglichen werden. Abbildung (4.13) illustriert den Verlauf der Lücke Δ . Am D-Punkt ist Δ maximal und sinkt monoton für anwachsende α ($\alpha \rightarrow \infty$ entspricht entkoppelten Ketten mit $\Delta = 0$). Dabei verschlechtert sich das Resultat des MP-Ansatzes

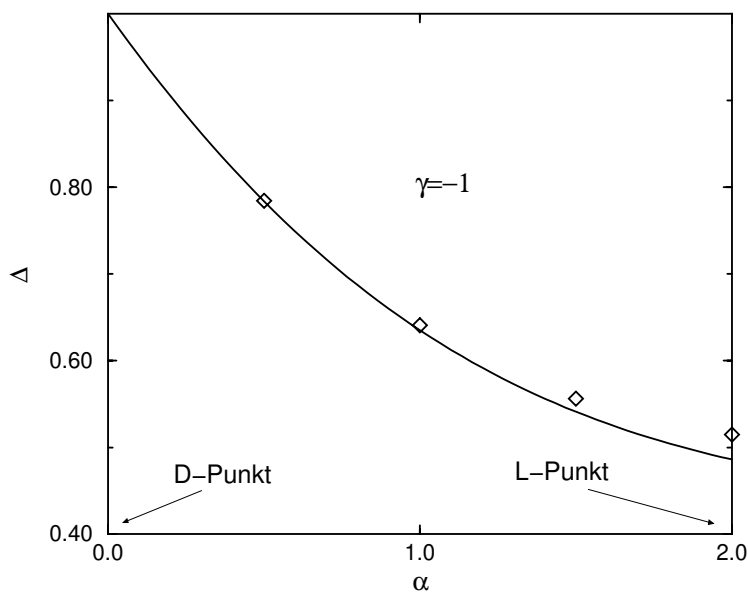


Abbildung 4.13: Die Energielücke $\Delta = \omega(\pi)$ auf der Linie $\gamma = -1$. Die Symbole stellen extrapolierte Lanczos-Daten dar.

für anwachsende α . Am D-Punkt liefert der MP-Ansatz trivialerweise das exakte Ergebnis $\Delta = 1$. Am Leiterpunkt $(2, -1)$ beträgt der Unterschied zwischen der MP-Energielücke und dem numerischen Wert $\Delta \approx 0.5017$ ca. 3%.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden niederenergetische Anregungen verschiedener eindimensionaler Antiferromagneten mit periodischen Randbedingungen untersucht. Die betrachteten Anregungen ließen sich in zwei elementare Typen unterteilen, Magnonen (Spinwellen) und Domänenwände. Magnonen, welche beispielsweise die elementaren Anregungen des Heisenberg-Ferromagneten sowie des Heisenberg-Ferrimagneten darstellen, sind translationsinvariante Linearkombinationen lokaler Spin-Abweichungen. Domänenwände sind translationsinvariante Linearkombinationen von Zuständen, die eine Verbindung zweier entarteter Grundzustände darstellen. Diese Anregungen treten in Systemen mit gerader Anzahl von Gitterplätzen nur als Paare auf.

Domänenwände als Verbindung zweier langreichweitig antiferromagnetisch geordneter Grundzustände sind die elementaren Anregungen anisotroper Heisenberg-Ising-Modelle (xxz-Modelle) in der Néel-Phase. Domänenwände in Form eines freien Spins $S = 1/2$ zwischen zwei dimerisierten Singlett-Grundzuständen werden als Kinks bezeichnet und sind die elementaren Anregungen des $S = 1/2$ Heisenberg-Antiferromagneten mit alternierender nächster-Nachbar-Wechselwirkung und übernächster-Nachbar-Wechselwirkung (Zick-Zack-Ketten) in einer Phase, die durch eine endliche Anregungslücke und Grundzustände mit exponentiell zerfallenden räumlichen Korrelationen charakterisiert ist.

Im ersten Kapitel wurden bereits bekannte Eigenschaften ferromagnetischer Magnonen wiederholt. Es existieren $(2SN + 1)$ Grundzustände $|S_{tot} = SN, S_{tot}^z\rangle$, welche die Rotations-symmetrie des Hamilton-Operators brechen. Dabei bezeichnet S die Länge der Spins, N die Anzahl der Gitterplätze. Wie beispielsweise in [23] dargestellt, ist es möglich die Eigenzustände der 1-Magnonanregungen im Unterraum mit $S_{tot}^z = NS - 1$ und die der 2-Magnonanregungen Unterraum mit $S_{tot}^z = NS - 2$ zu konstruieren. Die 1-Magnonanregung, die eine quadratische Dispersionsrelation für kleine Werte des Wellenvektors besitzt, ist die Goldstone-Mode dieses Systems. Zwei ferromagnetische Magnonen bilden einen gebundenen Zustand und ein Kontinuum, wobei der gebundene Zustand energetisch unter dem Kontinuum liegt. Die Bindungsenergie zweier Magnonen nimmt für wachsenden S ab, für $S \rightarrow \infty$ existieren nur Kontinuumszustände.

Der Heisenberg-Antiferromagnet mit zwei verschiedenen, alternierenden magnetischen Ionen S_A und S_B wurden im zweiten Kapitel untersucht. Aus dem Lieb-Mattis-Theorem ließ sich auf einen Grundzustandsspin von $|S_A - S_B|$ pro Einheitszelle schließen. Der Grundzustand mit maximalem S_{tot}^z besitzt eine makroskopische Magnetisierung, die geringer als die Magnetisierung $S_A + S_B$ pro Einheitszelle des entsprechenden ferromagnetischen Grund-

zustands dieses Systems ist. Aus diesem Grund wurde der Heisenberg-Antiferromagnet mit zwei verschiedenen alternierenden Zentren in dieser Arbeit als Ferrimagnet bezeichnet.

Im Grenzfall $S \rightarrow \infty$ ($S_A = 2S, S_B = S$) wurde das System mittels linearer Spinwellentheorie (LSWT) analysiert. Es ergab sich ein langreichweitig geordneter Grundzustand mit endlicher Spinreduktion. Weiterhin traten zwei Anregungszweige auf. Für Magnetisierungen kleiner $|S_A - S_B|$ sind die Anregungen durch Magnonen mit verschwindender Energielücke und einer Dispersion $\omega(k) \propto k^2$, $k \ll \pi$ gegeben (ferromagnetische Magnonen), für Magnetisierungen größer $|S_A - S_B|$ sind die Anregungen Magnonen mit $\omega(k) \propto k^2$, $k \ll \pi$ und einer Anregungslücke der Größe des Austauschintegrals (optische Moden).

Die LSWT-Ergebnisse wurden mit numerischen Daten für den Fall $S_A = 1, S_B = 1/2$ verglichen, die durch exakte Diagonalisierung mittels des Lanczos-Algorithmus gewonnen wurden. Die Lanczos-Daten stimmen qualitativ mit den LSWT-Ergebnissen überein. Für die Spinwellensteifigkeit der ferromagnetischen Magnonen ergibt sich aus der Numerik der Wert $v \approx 0.37$ im Gegensatz zu $v_{\text{LSWT}} = 1/2$. Bemerkenswert ist die Größe der Energielücke des antiferromagnetischen Magnons $\Delta \approx 1.75J$. Weiterhin konnten gebundene 2-Magnonzustände im ferromagnetischen Zweig der numerischen Spektren identifiziert werden. Dies bestätigt die Analogie des ferromagnetischen Zweiges mit dem im ersten Kapitel beschriebenen Ferromagneten.

Vor dem Hintergrund der Haldane'schen Vermutung wurden im dritten Kapitel die Quantenphasenübergänge Néel-Phase \rightarrow Heisenberg-Phase und Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase in Heisenberg-Ising-Antiferromagneten mit den halbzahligen Spins $S = 1/2, 3/2$ beziehungsweise den ganzzahligen Spins $S = 1, 2$ untersucht. Zu diesem Zweck wurden Störungsreihen nach der Anisotropie λ , wobei $\lambda = 0$ dem Ising-Grenzfall entspricht, für Grundzustandserwartungswerte und Anregungsenergien von Magnonen und Domänenwänden berechnet. Die Störungsreihen wurden numerisch mit einer rekursiven Formulierung der stationären Störungstheorie gewonnen. Die Analyse der Reihenentwicklungen mittels Padé-Approximanden und D-log-Padé-Approximanden ermöglichte die Bestimmung kritischer Anisotropien und kritischer Exponenten.

Die aus den Approximanden gewonnenen Grundzustandsenergien für $S = 1/2, 1, 3/2, 2$ weisen Abweichungen von den exakten Grundzustandsenergien zwischen 0.005% ($S = 1/2$) und 1.4% ($S = 1$) auf. Die Approximanden der Untergittermagnetisierung, die der Ordnungsparameter der Néel-Phase ist, sowie die des statischen Strukturfaktors $S^{zz}(\pi)$ führten auf eine Abschätzung der kritischen Kopplungen von $\lambda_c \approx 1$ für $S = 1/2, 3/2$, $\lambda_c \approx 0.85$ für $S = 1$ und $\lambda_c \lesssim 1$ für $S = 2$. Die kritischen Exponenten $\beta \approx 1/8$ und $\eta \approx 1/4$ der $S = 1, 2$ xxz-Kette entsprechen denen des zweidimensionalen Ising-Modells. Der kritische Exponent σ^{zz} des Strukturfaktors $S^{zz}(\pi) \propto 1/(\lambda_c - \lambda)^{\sigma^{zz}}$ nimmt sowohl für $S = 1/2$ als auch für $S = 3/2$ den Wert $\sigma^{zz} \approx 1$ an. Im Fall des $S = 1/2$ Systems führt dieser Wert auf einen scheinbaren Widerspruch, der die Einführung logarithmischer Korrekturen

zur Korrelationsfunktion nach sich zieht [12].

Bessere Abschätzungen der kritischen Anisotropien als durch den Ordnungsparameter und den statischen Strukturfaktor ergaben sich aus der Analyse der Soft-Moden. Für sämtliche niederenergetischen Domänenwandanregungen, die durch die Magnetisierung in Ketten ungerader Länge klassifiziert werden konnten, wurden Reihenentwicklungen und Approximanden berechnet.

In xxz-Ketten mit ganzzahligem Spin ($S=1,2$) wird der Quanten-Phasenübergang Néel-Phase \rightarrow Haldane-Phase durch Kondensation von Spin-Zero-Defekten (SZD's) hervorgerufen. Diese als Nullprojektionen von S^z in antiferromagnetischer Ordnung definierten Anregungen können ausschließlich in Ketten mit ganzzahligem Spin auftreten. Es ergaben sich die kritischen Punkte $\lambda_c \approx 0.8431$ für $S = 1$ und $\lambda_c \approx 0.96$ für $S = 2$.

Die Approximanden der Störungsreihe für die Energielücke des $S = 1/2$ Modells weisen in Übereinstimmung mit den Bethe-Ansatz-Resultaten das für einen Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang charakteristische exponentielle Verschwinden auf. Dieses kritische Verhalten konnte für die $S = 3/2$ xxz-Kette, die am isotropen Punkt $\lambda = 1$ zu derselben Universalitätsklasse wie das $S = 1/2$ Modell gehört, nicht bestimmt werden. Im Fall des $S = 3/2$ Modells verschwinden die Approximanden der niedrigsten Moden unterschiedlicher Domänenwände am isotropen Punkt. Es war jedoch nicht möglich, ein exponentielles Verschwinden der Energielücke aus den Approximanden der vorhandenen Reihenentwicklungen zu bestimmen.

Schließlich wurde der Zusammenhang zwischen Magnonen und Domänenwänden in Heisenberg-Ising-Modellen untersucht. Im Fall der $S = 1/2$ Kette ist das Magnon Teil eines 2-Domänenwandkontinuums. Für die Modelle mit $S > 1/2$ konnten Magnonen als gebundene Zustände zweier Domänenwände charakterisiert werden. Dabei liegen diese gebundenen Zustände energetisch in der gesamten Néel-Phase unterhalb der entsprechenden 2-Domänenwandkontinua, die Bindungen brechen an den kritischen Punkten auf. Dieses Verhalten tritt gleichermaßen in den xxz-Ketten mit $S = 1, 3/2, 2$ auf.

Thema des letzten Kapitels war die Untersuchung von Kinks beziehungsweise Kink-Paaren in $S = 1/2$ Zick-Zack-Ketten. Das zu diesem Modell gehörige Phasendiagramm wird von zwei Parametern aufgespannt, dem Austauschintegral der alternierenden nächste-Nachbar-Wechselwirkung und dem der übernächsten-Nachbar-Wechselwirkung. Der Grundzustand der Zick-Zack-Kette besitzt im gesamten Phasendiagramm mit Ausnahme einer kritischen Linie exponentiell zerfallende Korrelationsfunktionen.

Zunächst wurde eine Matrix-Produkt-Variationswellenfunktion mit $S_{tot} = 0$ für den Grundzustand konstruiert. Diese Variationswellenfunktion besitzt exponentiell zerfallende Korrelationsfunktionen und enthält die beiden exakten Grundzustände des Majumdar-Ghosh-Modells. Für den $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagneten, der sich im Grenzfall starker ferromagnetischer alternierender Wechselwirkung ergibt, wird die Variationswellenfunktion zum AKLT-Zustand. Die Matrix-Produkt-Wellenfunktion beschreibt den exakten Grundzustand

im gesamten Phasendiagramm - mit Ausnahme der kritischen Linie - qualitativ korrekt.

Im Rahmen des Matrix-Produkt-Formalismus konnte weiterhin eine 2-Kink-Variationswellenfunktion zur Beschreibung der niederenergetischen Anregung mit $S_{tot} = 1$ konstruiert werden. Variationsparameter dieser 2-Teilchen-Wellenfunktion ist die Lokalisierungslänge ξ der beiden Kinks. Im Fall des Majumdar-Ghosh-Modells beschreibt die 2-Teilchen-Wellenfunktion einen Streuzustand ($\xi = \infty$) zweier Sutherland-Shastry-Kinks, die als freie Spins $S = 1/2$ zwischen den beiden Majumdar-Ghosh-Grundzuständen definiert sind. Für endliche alternierende nächste-Nachbar-Wechselwirkung existieren ausschließlich gebundene Zustände, d.h. $\xi < \infty$ für alle Werte des Schwerpunktswellenvektors. Ein Vergleich mit aus der Literatur bekannten Lanczos-Daten zeigt, daß die 2-Kink-Variationswellenfunktion die niederenergetischen Triplet-Anregungen qualitativ korrekt beschreibt. Im Fall der Spinleiter weicht der aus dem Variationsansatz resultierende Wert der Energielücke 3% vom exakten Wert $\Delta \approx 0.5017$ ab. Für den Grenzfall des $S = 1$ Heisenberg-Antiferromagneten reduziert sich die Variationswellenfunktion auf die aus der Literatur bekannte Näherung [46]. Somit stellen sich sowohl das Leiter-Triplett als auch das Haldane-Triplett als gebundene Zustände zweier $S = 1/2$ Kinks dar.

Das Phasendiagramm der Zick-Zack-Kette beinhaltet eine inkommensurable Region, in welcher der Wellenvektor der niedrigsten Mode von $k_0 = 0$ nach $k_0 = \pi$ wechselt. Bemerkenswert ist, daß dieser Wechsel von k_0 qualitativ korrekt durch die 2-Teilchen-Wellenfunktion wiedergegeben wird. Auf diese Weise konnte die inkommensurable Region im Phasendiagramm der $S = 1/2$ Zick-Zack-Kette erstmals näherungsweise bestimmt werden.

Teile dieser Arbeit wurden aus Prioritätsgründen in [31], [34], [73], [83] veröffentlicht.

ANHANG A

Entwicklung elliptischer Integrale

Im dritten Kapitel wurden die Dispersionsrelation sowie die Untergittermagnetisierung pro Spin des $S = 1/2$ xxz-Antiferromagneten nach [6], [68] durch die Ausdrücke

$$\epsilon(q) = \sqrt{1 - \lambda^2} \frac{K(k)}{\pi} \sqrt{1 - k^2 \cos^2(q)}, \quad \frac{1}{\lambda} = \cosh \left(\pi \frac{K'}{K}(k) \right) \quad (\text{A.1})$$

$$\langle M_A \rangle = \sqrt{1 - k^2} \frac{K(k)}{\pi}, \quad Q^2 = e^{-\pi \frac{K'(k)}{K(k)}}, \quad \lambda^2 = \frac{4Q^2}{(1 + Q^2)^2} \quad (\text{A.2})$$

beschrieben (s. (3.9), (3.41)). Dabei ist $K(k)$ das elliptische Integral erster Art mit dem Modul k . Der komplementäre Modul ist durch $k' = \sqrt{1 - k^2}$ definiert und es gilt:

$$K(k') = K'(k), \quad K'(k') = K(k) \quad (\text{A.3})$$

Es soll einerseits gezeigt werden, wie man aus (A.1) und (A.2) Potenzreihen für die Dispersionsrelation und die Untergittermagnetisierung gewinnt, andererseits kann das kritische Verhalten am isotropen Punkt ermittelt werden.

Berechnung der Potenzreihen

Aus den Reihenentwicklungen [99]

$$K(k) = \frac{\pi}{2} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{(2n-1)!!}{2^n \cdot n!} \right)^2 k^{2n} \right] \quad (\text{A.4})$$

$$K(k') = \ln \left(\frac{4}{k} \right) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{(2n-1)!!}{2^n \cdot n!} \right)^2 \left(\ln \left(\frac{4}{k} \right) - 2 \sum_{m=1}^n \frac{1}{(2m-1)2m} \right) k^{2n} \quad (\text{A.5})$$

ergibt sich im Zusammenhang mit (A.1) bzw. (A.2) eine Reihenentwicklung für $\lambda(k^2)$. Aus dieser Entwicklung lassen sich sukzessive die Koeffizienten der Potenzreihe der Umkehrfunktion $k^2(\lambda)$ bestimmen. Indem man diese Reihe in der rechten Gleichungsseite von (A.4) substituiert, ist es möglich, Potenzreihen für $K(\lambda)$ anzugeben. Somit ergeben sich folgende Entwicklungen für die Größen $\epsilon^2(k)$ und $\langle M_A \rangle$:

$$\begin{aligned} \epsilon^2(q) &= \frac{1}{4} + \frac{5}{4}\lambda^2 - \frac{3}{8}\lambda^4 + \frac{3}{32}\lambda^6 + \frac{3}{128}\lambda^8 - \frac{9}{2048}\lambda^{12} \\ &- \frac{27}{8192}\lambda^{14} - \frac{51}{32768}\lambda^{16} - \frac{51}{131072}\lambda^{18} + \frac{45}{262144}\lambda^{20} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \cos(2q) \left(\lambda^1 + \frac{1}{4}\lambda^3 - \frac{1}{64}\lambda^7 - \frac{1}{256}\lambda^9 + \frac{1}{1024}\lambda^{11} \right. \\
& \left. + \frac{3}{2048}\lambda^{13} + \frac{7}{8192}\lambda^{15} + \frac{5}{16384}\lambda^{17} + \frac{1}{131072}\lambda^{19} \right) \\
\langle M_A \rangle & = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\lambda^2 - \frac{1}{8}\lambda^4 - \frac{1}{32}\lambda^6 + \frac{1}{128}\lambda^8 + \frac{3}{128}\lambda^{10} + \frac{57}{2048}\lambda^{12} \\
& + \frac{221}{8192}\lambda^{14} + \frac{783}{32768}\lambda^{16} + \frac{2633}{131072}\lambda^{18} + \frac{4267}{262144}\lambda^{20} \\
& + \frac{26811}{2097152}\lambda^{22} + \frac{81627}{8388608}\lambda^{24} + \frac{119759}{16777216}\lambda^{26} + \frac{668783}{134217728}\lambda^{28}
\end{aligned}$$

Kritisches Verhalten

Das kritische Verhalten der Anregungslücke sowie der Untergittermagnetisierung ist im wesentlichen durch den komplementären Modul bestimmt:

$\pi \Delta = \sqrt{1 - \lambda^2} K'(k') |k'|$ und $\pi \langle M_A \rangle = K'(k') |k'|$. Als kleine Größe am kritischen Punkt definiert man:

$$\tau = \frac{1}{\lambda} - 1 = \begin{cases} \cosh \left(\pi \frac{K(k')}{K'(k')} \right) - 1 = \frac{\pi^4}{8} x^2 + \dots, & \text{für } \Delta \\ 2 \sinh^2 \left(\frac{\pi}{4} \frac{K(k')}{K'(k')} \right) = \frac{\pi^4}{32} x^2 + \dots, & \text{für } \langle M_A \rangle \end{cases}, \quad x = -\frac{1}{\ln(\frac{k'}{4})} \quad (\text{A.6})$$

Aus (A.6) ergibt sich das exponentielle Verschwinden des komplementären Moduls für $\tau \ll 1$. Indem man k' in der Formel für die Anregungslücke bzw. die Untergittermagnetisierung substituiert, ergeben sich die Näherungsausdrücke (3.36) und (3.43)

$$\Delta(\tau) \propto e^{-\frac{\pi^2}{2\sqrt{2}\tau}}, \quad \langle M_A \rangle \propto e^{-\frac{\pi^2}{4\sqrt{2}\tau}}, \quad \tau \ll 1 \quad (\text{A.7})$$

des dritten Kapitels.

ANHANG B

Algorithmus zur rekursiven Störungstheorie

Es soll der auf den rekursiven Relationen (3.28) und (3.29) beruhende Algorithmus schematisch beschrieben werden. Der Algorithmus gliedert sich im wesentlichen in drei Teile:

- Bestimmung und Speicherung der Basiszustände, welche für die Berechnung der störungstheoretischen Reihen bis zur Ordnung a (einschließlich) benötigt werden.
- Berechnung der Matrixelemente $U_{i_1, i_2} = \langle i_1 | H_T | i_2 \rangle$ sowie Speicherung der von Null verschiedenen Elemente.
- Ausführen der durch (3.29) definierten Rekursion mit den U_{i_1, i_2} .

Basis

Zunächst soll auf die Darstellung und Berechnung der Basis eingegangen werden. Der Hamilton-Operator vertauscht mit dem Translationsoperator T und dem Magnetisierungsoperator \hat{S}_{tot}^z . Ein Zustand $|i\rangle$ wird im Computerprogramm durch eine Integer-Zahl b_i dargestellt. Der Index i der Zahl b_i wird hier als *Identifizierungsnummer* bezeichnet. Ein einzelner Spin S hat $2S + 1$ *Einstellmöglichkeiten* (S^z -Eigenwerte), weshalb eine p -adische Darstellung für die Integer-Zahl mit $p = 2S + 1$ gewählt wird:

$$|i\rangle \hat{=} b_i = x_0 p^0 + x_1 p^1 + x_2 p^2 + \dots + x_{N-2} p^{N-2} + x_{N-1} p^{N-1} \quad (\text{B.1})$$

Es besteht der Zusammenhang $S_n^z = x_{n-1} - S$, wobei $n = 1, \dots, N$ die Spins numeriert. Die Zahl b_i kann durch *Integer-Division* in die einzelnen x_n zerlegt werden:

$$x_{N-1} = b_i / p^{N-1} \longrightarrow x_{N-2} = b_i / p^{N-2} - x_{N-1} p^1 \longrightarrow \dots$$

Der lokale Hamilton-Operator $h_{n, n+1}$ wird in die Anteile

$$h_{n, n+1}^{zz} = S_n^z S_{n+1}^z, \quad h_{n, n+1}^{+-} = S_n^+ S_{n+1}^-, \quad h_{n, n+1}^{-+} = S_n^- S_{n+1}^+$$

aufgespalten. Die Computerroutinen dieser lokalen Operatoren enthalten Tabellen, die einer bestimmten Konfiguration zweier Spins eine neue Konfiguration und eine Zahl (*lokales* Matrixelement) zuweisen. Als Beispiel sei die $S = 1/2$ Konfiguration $\uparrow\downarrow$ betrachtet. Dieser

Konfiguration entspricht die binäre Zahl $1 \cdot 2^0 + 0 \cdot 2^1 = 01$. Die Wirkung von $h_{1,2}$ auf diese Konfiguration wird durch die Abbildung

$$\begin{aligned} h_{1,2}^{zz} &: 01 \longmapsto 01, & \text{lokales Matrixelement: } -1/4 \\ h_{1,2}^{+-} &: 01 \longmapsto -1, & \text{lokales Matrixelement: } 0 \\ h_{1,2}^{-+} &: 01 \longmapsto 10, & \text{lokales Matrixelement: } 1/2 \end{aligned}$$

wiedergegeben. Dabei entspricht der binären Zahl 10 die Konfiguration $10 = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^1 \triangleq \downarrow\uparrow$. Die Zahl (-1) ist eine Konvention für die Abbildung auf den Nullvektor.

Mit dem Hamilton-Operator kann die störungstheoretische Basis bis zur a -ten Ordnung (einschließlich) berechnet werden. (Bemerkung: Diese Basis entspricht nicht der vollständigen Basis, wie sie bei exakter Diagonalisierung benötigt wird! Die störungstheoretische Basis enthält nur die Zustände, die zu Koeffizienten der Potenzreihe für die Energie bis zur a -ten Ordnung beitragen.) Die Basis wird folgendermaßen unterteilt:

$$\begin{aligned} B^{(a)} &= B_0 \cup B_1 \cup B_2 \cup \dots \cup B_{a/2-1} \cup B_{a/2} \\ B_0 &= \{|j^R\rangle\}, \quad B_l \cap B_{l'} = \emptyset \quad (l \neq l'), \quad l, l' = 0, 1, \dots, a/2 \end{aligned}$$

Der Zustand $|j^R\rangle$ bezeichnet einen Repräsentanten des Ausgangszustands

$$|j\rangle = \sum_{n=1}^N T^n e^{ikn} |j^R\rangle, \quad (\text{B.2})$$

der ein Eigenzustand zum Translationsoperator ist. Der Repräsentant ist durch die Bedingung $b_{j^R} \leq T^n b_{j^R}$, $n = 1, 2, \dots, N-1$ festgelegt. Die B_l Unterräume sind folgendermaßen definiert:

$$H_T |j^R\rangle \rightarrow B_1, \quad H_T \{|i_1^R\rangle \in B_1\} \rightarrow B_2 \cup B_0, \quad H_T \{|i_2^R\rangle \in B_2\} \rightarrow B_3 \cup B_1 \dots$$

Gespeichert werden ausschließlich die Zahlen $b_{i_1^R}, b_{i_2^R}, \dots$ der Repräsentanten. Die Eigenzustände des Translationsoperators ergeben sich analog zu (B.2).

Im Gesamttraum $B^{(a)}$ treten keine Unterräume B_l , $l > a/2$ auf. Dies ergibt sich aus dem Koeffizienten a -ter Ordnung der Potenzreihe für die Energie, der neben Beiträgen aus niedrigeren Ordnungen den Term

$$\sum_{\{i_\nu\} \neq j} \frac{U_{j,i_1} U_{i_1,i_2} \dots U_{a-2,a-1} U_{a-1,j}}{(\epsilon_j - \epsilon_{i_1})(\epsilon_{i_1} - \epsilon_{i_2}) \dots (\epsilon_{a-2} - \epsilon_{a-1})(\epsilon_{a-1} - \epsilon_j)}, \quad (U_{n,m} = \langle n | H_T | m \rangle)$$

enthält.

Neben den Zahlen $b_{i_1^R}, b_{i_2^R}, \dots$ werden die Identifikationsnummern i_1, i_2, \dots gespeichert. Zur Identifikation der Zustände müssen inverse Listen angelegt werden, die es ermöglichen, bei vorgegebenem Zustand die Identifikationsnummern zu ermitteln. Dafür wurde die Primzahlkodierung benutzt: Zunächst muß eine Primzahl P berechnet werden, die größer als die

Kehrwert des Quadrats der Norm ergibt sich:

$$\langle i_r | i_r \rangle = \left(\sum_{\nu=0}^{N/\eta-1} e^{-i\eta\nu k} \right) \cdot \left(\sum_{\nu=0}^{N/\eta-1} e^{i\eta\nu k} \right) = \begin{cases} 0, & \eta k = 2\pi \\ \frac{N^2}{\eta}, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Ist die Anzahl der voneinander verschiedenen Matrixelemente $\lesssim 400$, so kann auf folgende Art und Weise viel Speicherplatz gespart werden: Statt zwei Arrays - eins zur Speicherung der Matrixelemente, das andere zur Speicherung der zugehörigen Indizes - anzulegen, definiert man nur ein Adressen-Array (groß!). Ein Eintrag dieses Arrays enthält auf den unteren Bits die Indizes eines *nichtverschwindenden* Matrixelements, die oberen Bits werden mit einer zusätzlichen Zahl (Zeiger) belegt. In einem Element-Array (klein!) sind die voneinander verschiedenen Matrixelemente gespeichert. Der Zeiger gibt an, welches Matrixelement des Element-Arrays zur Adresse des Adressen-Arrays gehört.

Rekursion

Schließlich kann die Rekursion mit den berechneten Matrixelementen ausgeführt werden. Die Rekursionsgleichung (3.29) nimmt entsprechend der Aufteilung der Basis in die B_r -Unterräume folgende Form an:

$$c_{i_r}^{(\mu,j)} = \frac{1}{\epsilon_{i_r} - \epsilon_j} \left(\sum_{\nu=1}^{\mu-1} e_{i_r}^{(\nu,j)} c_{i_r}^{(\mu-\nu,j)} - \sum_{i_{r-1}} c_{i_{r-1}}^{(\mu-1,j)} \langle i_r | H_T | i_{r-1} \rangle - \sum_{i_{r+1}} c_{i_{r+1}}^{(\mu-1,j)} \langle i_r | H_T | i_{r+1} \rangle \right), \quad |i_r\rangle \in B_r \quad (\text{B.5})$$

Die Formel (B.5) ist für $\mu \geq 2$ gültig. Der Rekursionsanfang ist durch $|\psi_0^{(j)}\rangle = |j\rangle$ (ungestörter Zustand), $e_1^{(j)} = \langle j | H_T | j \rangle$ und $c_{i_1}^{(1,j)} = \langle i_1 | H_T | j \rangle / (\epsilon_{i_1} - \epsilon_j)$ definiert. Die Koeffizienten der Potenzreihe für die Energie $e_\mu^{(j)}$ ergeben sich aus der Gleichung (vgl. (3.28))

$$e_\mu^{(j)} = \langle j | H_T | \psi_{\mu-1}^{(j)} \rangle = \sum_{i_1} c_{i_1}^{(\mu-1,j)} \langle j | H_T | i_1 \rangle, \quad |j\rangle \in B_0, |i_1\rangle \in B_1. \quad (\text{B.6})$$

Die unnormierte störungstheoretische Wellenfunktion ist durch die $c_{i_r}^{(\mu,j)}$ gegeben:

$$|\psi_j^{(a-1)}\rangle = |j\rangle + \sum_{\mu=1}^{a-1} \lambda^\mu |\psi_\mu^{(j)}\rangle, \quad |\psi_\mu^{(j)}\rangle = \begin{cases} \sum_{r=1}^{\mu} \left(\sum_{i_r} c_{i_r}^{(\mu,j)} |i_r\rangle \right), & \mu \leq \frac{a}{2} \\ \sum_{r=1}^{a-\mu} \left(\sum_{i_r} c_{i_r}^{(\mu,j)} |i_r\rangle \right), & \mu > \frac{a}{2} \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Die Norm $\mathcal{N}^{(a)}$ dieser Wellenfunktion ist durch die $c_{i_r}^{(\mu,j)}$ sowie durch die Normen der Basiszustände $1/\sqrt{\langle i_r | i_r \rangle}$, welche durch die Formel (B.4) gegeben sind, bestimmt:

$$\left(\frac{1}{\mathcal{N}^{(a)}} \right)^2 = \langle \psi_j^{(a-1)} | \psi_j^{(a-1)} \rangle = \langle j | j \rangle + \sum_{\gamma=2}^a \lambda^\gamma \left(\sum_{\mu=1}^{\gamma-1} \langle \psi_{\gamma-\mu}^{(j)} | \psi_\mu^{(j)} \rangle \right)$$

$$\langle \psi_{\gamma-\mu}^{(j)} | \psi_{\mu}^{(j)} \rangle = \sum_{r=1}^{\min(\gamma-\mu, \mu)} \left(\sum_{i_r} (c_{i_r}^{(\gamma-\mu, j)})^* c_{i_r}^{(\mu, j)} \langle i_r | i_r \rangle \right)$$

Das Rekursionsschema ist graphisch in Abbildung (B.1) dargestellt.

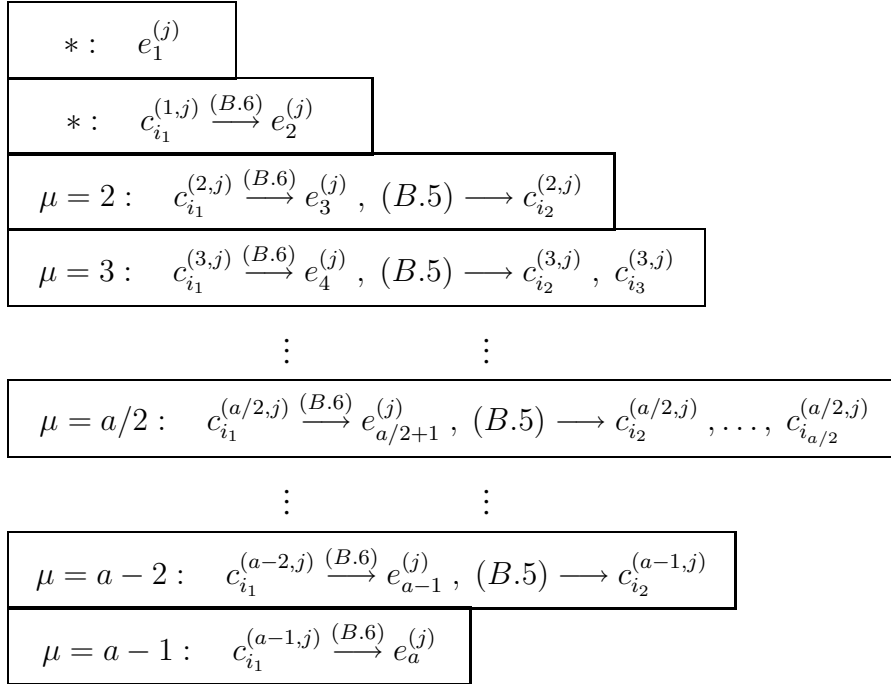


Abbildung B.1: Das den Gleichungen (B.5),(B.6) entsprechende Rekursionsschema. Das Symbol * bezeichnet den Rekursionsanfang.

Bemerkungen

Abschließend sollen einige Bemerkungen zum oben dargestellten Algorithmus gemacht werden:

- Die Zahlen b_i zur Darstellung der Zustände können insbesondere für große S den Wert 2^{31} übersteigen. Beispielsweise benötigt man zur Berechnung der Grundzustandsenergie des $S = 2$ Antiferromagneten in 12-ter Ordnung eine minimale Kettenlänge von $N = 14$. Für diesen Fall gilt $5^{14} > 2^{31}$. Fortran-Compiler für 32-Bit-Prozessoren sehen keine Zahlen dieser Größe vor, daher müssen spezielle Module für lange Integer-Zahlen verwendet werden. Die Verwendung dieser Module führt zu extrem langsamen Zahlenoperationen, die Effektivität des Programms wird dadurch stark herabgesetzt. Aus diesem Grund erweist es sich als sehr vorteilhaft, Computer mit 64-Bit-Prozessoren zu verwenden.
- In Abschnitt 3.1 wurde die minimale Länge der Ordnung a mit $N_{min} = a + 1$ angegeben (Grundzustand). Die minimale Länge ergibt sich aus der Tatsache, daß nur

zusammenhängende Terme (Cluster) zur Störungsreihe beitragen [100]. Diese Terme sind durch ein Cluster benachbarter Spins mit folgenden Eigenschaften charakterisiert:

- Alle involvierten Wechselwirkungen liegen innerhalb dieses Clusters.
- Jeder Spin des Clusters ist in mindestens eine Wechselwirkung involviert.

Aus dieser Definition geht hervor, daß das größte zusammenhängende Cluster für nächste-Nachbar-Wechselwirkung in a -ter Ordnung die Länge $a + 1$ hat.

Als Beispiel soll folgender nichtzusammenhängender Term in der 4-ten Ordnung der $S = 1/2$ Kette betrachtet werden (s. (3.24)):

$$\begin{array}{ccccccc}
 \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow & \xrightarrow{S_4^+ S_5^-} & \uparrow\uparrow\uparrow \boxed{\uparrow\downarrow} \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow & \xrightarrow{S_8^+ S_9^-} & \uparrow\downarrow\uparrow \boxed{\uparrow\downarrow} \downarrow\uparrow \boxed{\uparrow\downarrow} \downarrow\uparrow\downarrow \\
 & & \xrightarrow{S_4^- S_5^+} & & \xrightarrow{S_8^- S_9^+} \\
 & & \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \boxed{\uparrow\downarrow} \downarrow\uparrow\downarrow & & \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow
 \end{array}$$

Insgesamt gibt es $N(N - 5)$ Terme dieser Art. Da diese Terme in beiden Summen des Koeffizienten $e_4^{(\text{Néel})}$ in (3.24) auftreten, jedoch mit unterschiedlichem Vorzeichen, ergeben sie keinen Beitrag. Somit enthält $e_4^{(\text{Néel})}$ ausschließlich Terme $\propto N$.

- Die Routine zur Basiserzeugung berechnet sämtliche Zustände aus der Wirkung von H_T . Insbesondere werden Zustände, die zu nichtzusammenhängenden Termen führen, berechnet und gespeichert. In diesem Punkt sind Cluster-Algorithmen sehr viel effektiver, da nur zusammenhängende Cluster in die Rechnung eingehen [58]. Andererseits sind diese Algorithmen komplizierter, da die zusammenhängenden Cluster zunächst berechnet und klassifiziert werden müssen.

ANHANG C

Tabellierung von Störungsreihen

Ordnung	$S = 1/2$	$S = 1$	$S = 3/2$	$S = 2$
0	1/4	1	9/4	2
2	-0.25000000	-0.3333333	-0.4500000	-0.571428
4	0.06250000	-0.042592	-0.067500	-0.091724
6	0.00000000	-0.007807	-0.023399	-0.034236
8	-0.00396250	-0.008225	-0.011193	-0.017295
10	-0.00195312	-0.004096	-0.006734	-0.010304
12	-0.00048828	-0.003749	-0.004377	-0.006802
14	0.00012207	-0.003174	-0.003010	-0.00479585
16	0.00025939	-0.002854	-0.002187	-0.003544
18	0.00021362	-0.002835	-0.001656	-0.002716
20	0.00012779	-0.002851	—	—
22	0.00005578	—	—	—
24	0.00000977	—	—	—
26	-0.00001376	—	—	—
28	-0.00002214	—	—	—

Tabelle C.1: Reihenentwicklungen der Grundzustandsenergien für $S = 1/2, 1, 3/2, 2$. Die Koeffizienten der ungeraden Ordnungen verschwinden.

Ordnung	$S = 1/2$	$S = 1$	$S = 3/2$	$S = 2$
0	1/2	1	3/2	2
2	-0.500000	-0.222222	-0.180000	-0.163265
4	-0.125000	-0.143333	-0.103000	-0.091519
6	-0.031250	-0.086416	-0.071110	-0.063169
8	0.007812	-0.104500	-0.053812	-0.048157
10	0.023437	-0.098122	-0.045120	-0.039046
12	0.02783	-0.116345	-0.038862	-0.033006
14	0.0269	-0.133822	-0.033996	-0.028645
16	0.0238	-0.160250	-0.030377	-0.025331
18	0.0200	-0.196476	-0.027632	-0.022730
20	0.0162	-0.24413	—	—
22	0.012	—	—	—

Tabelle C.2: Reihenentwicklungen der Untergittermagnetisierungen für $S = 1/2, 1, 3/2, 2$.

Ordnung	$S = 1/2$	$S = 1$	$S = 3/2$	$S = 2$
2	0.2500	0.11111	0.090000	0.081632
4	0.5625	0.14123	0.088575	0.074383
6	0.6406	0.15555	0.088663	0.070793
8	0.6679	0.22722	0.087544	0.068036
10	0.6718	0.27788	0.088554	0.065781
12	0.6706	0.39524	0.088864	0.063991
14	0.6749	0.52848	0.088354	0.062431
16	0.6787	0.7297	0.08819	0.061039
18	0.6925	1.0030	—	—
20	0.6898	—	—	—
22	0.7272	—	—	—

Tabelle C.3: Reihenentwicklungen der Strukturfaktoren für $S = 1/2, 1, 3/2, 2$. Die Autokorrelationsanteile wurde subtrahiert.

Ordnung	$S = 1$	$S = 3/2$	$S = 2$
0	2	3	4
2	$1/3$ $-2 \cos^2(k)$	$3/10$ $-9/4 \cos^2(k)$	0.2857 $-2.6666 \cos^2(k)$
4	0.2879 $-0.7777 \cos^4(k)$	0.1042 $0.2742 \cos^2(k)$ $-0.7846 \cos^4(k)$	0.0770 $0.2635 \cos^2(k)$ $-0.8586 \cos^4(k)$
6	-0.1264 $+0.8463 \cos^2(k)$ $+0.8169 \cos^4(k)$ $-0.9296 \cos^6(k)$	0.0594 $+0.0305 \cos^2(k)$ $+0.3600 \cos^4(k)$ $-0.6086 \cos^6(k)$	0.0389 $+0.0402 \cos^2(k)$ $+0.2669 \cos^4(k)$ $-0.5801 \cos^6(k)$
8	0.0388 $+0.5729 \cos^2(k)$ $-0.9668 \cos^4(k)$ $+0.5856 \cos^6(k)$ $-0.9622 \cos^8(k)$	0.0093 $+0.0527 \cos^2(k)$ $+0.0500 \cos^4(k)$ $+0.3680 \cos^6(k)$ $-0.5517 \cos^8(k)$	0.0210 $+0.0170 \cos^2(k)$ $+0.0372 \cos^4(k)$ $+0.2647 \cos^6(k)$ $-0.4768 \cos^8(k)$

Tabelle C.4: RSST-Reihen für die Dispersionen $\omega(k)$ der $S = 1, 3/2, 2$ Magnonen mit expliziter k -Abhängigkeit.

Ordnung	$S = 1$	$S = 3/2$	$S = 2$
0	2	3	4
2	-1.6666	-1.9500	-2.3809
4	-0.4898	-0.4061	-0.5180
6	0.6073	-0.1586	-0.2339
8	-0.7315	-0.0714	-0.1367
10	0.2997	-0.0883	-0.0932
12	0.4173	-0.0473	-0.0701
14	-1.2107	-0.0412	-0.0538
16	0.7963	-0.0271	-0.0427

Tabelle C.5: RST-Reihen der niedrigsten Magnonmoden $\omega(0)$ für $S = 1, 3/2, 2$.

Ordnung	$S = 1$ SZD, $\omega^+(\pi)$	$S = 3/2$ $S_{tot,odd}^z = 1/2,$ $\omega^-(\pi/2)$	$S = 3/2$ $S_{tot,odd}^z = 3/2,$ $\omega(\pi/2)$	$S = 2$ SZD, $\omega^-(\pi)$
0	2	9/2	9/2	8
1	-2	-3/2	0	0
2	-2/3	-5.512500	-9/10	-23.314285
3	2/3	2.633437	-9/4	0
4	-1.207407	22.173373	-2.032875	425.102701
5	1.971666	-61.12730	-9/10	0
6	-2.723225	-125.4382	1.907756	$-1.7458 \cdot 10^4$
7	3.294885	912.4029	5.361715	0
8	-3.400477	54.0239	6.352873	$8.9611 \cdot 10^5$
9	2.240766	$-1.2472 \cdot 10^4$	-0.213111	0
10	1.57133	$2.1034 \cdot 10^4$	-18.07852	$-5.1541 \cdot 10^7$
11	-9.75420	$1.4766 \cdot 10^5$	-40.4418	0
12	24.1695	$-5.8649 \cdot 10^5$	-40.8613	$3.1768 \cdot 10^9$
13	-46.0068	$-1.2561 \cdot 10^6$	25.7940	0
14	73.3777	$1.1697 \cdot 10^7$	184.9687	$-2.0515 \cdot 10^{11}$
15	-96.8595	$-9.9142 \cdot 10^5$	359.2760	0
16	93.0229	$-1.9220 \cdot 10^8$	274.7045	—

Tabelle C.6: Störungsreihen der niedrigsten Domänenwandmoden für $S = 1, 3/2, 2$ (vgl. auch Abbildung (3.10)).

ANHANG D

Energierwartungswert der 2-Kink-Wellenfunktion

Die Berechnung des im vierten Kapitel, Abschnitt 4.1, eingeführten Energierwartungswertes (4.23)

$$\omega(k, q, \xi) = \frac{\langle \psi_\mu(k, q) | \tilde{H} | \psi_\mu(k, q) \rangle}{\langle \psi_\mu(k, q) | \psi_\mu(k, q) \rangle}, \quad \tilde{H} = H - E_0(u_{min}) \quad (\text{D.1})$$

soll erläutert werden. Mit dem 2-Kink-Ansatz (4.20), (4.22) ergibt sich

$$\langle \psi_\mu(k, q) | \psi_\mu(k, q) \rangle = \sum_{m' > n'} \sum_{m > n} e^{iq_1(m-m') + iq_2(n-n') + (n'-m'+n-m)/\xi} \langle n' m'; \mu | n, m; \mu \rangle \quad (\text{D.2})$$

$$\langle \psi_\mu(k, q) | \tilde{H} | \psi_\mu(k, q) \rangle = \sum_{m' > n'} \sum_{m > n} e^{iq_1(m-m') + iq_2(n-n') + (n'-m'+n-m)/\xi} \langle n' m'; \mu | \tilde{H} | n, m; \mu \rangle. \quad (\text{D.3})$$

Dabei sind $q_1 = (k + q)/2$ und $q_2 = (k - q)/2$ die Wellenvektoren der beiden Kinks. Die Berechnung der Größen (D.2) und (D.3) erfolgt in vier Schritten:

1. Aufstellen der verschiedenen Fälle in den 4-fach Summationen.
2. Berechnung der einzelnen Fälle mit dem in Abschnitt 4.1 erwähnten Transfermatrixformalismus.
3. Ausführung der 4-fach Summation für jeden Fall.
4. Addition der verschiedenen Fälle.

Die Positionen 2. bis 4. der Aufzählung lassen sich sehr gut mit Computer-Algebra-Programmen berechnen, während Position 1. *per Hand* durchgeführt werden muß. Die Berechnung des Erwartungswertes (D.1) soll am Beispiel der Norm (D.2) erläutert werden.

Fallunterscheidungen

Zur Aufstellung der verschiedenen Fälle eignet sich die in Abbildung (D.1) gezeigte graphische Darstellung des Skalarprodukts $\langle n' m'; \mu | n, m; \mu \rangle$. Die oberen Linien symbolisieren die Bra's, die unteren Linien die Ket's. Der Teil der Wellenfunktion (4.20), (4.22), der durch

die g -Matrizen gegeben ist, wird mit A bezeichnet, der durch die $g^{(\text{MG1})}$ -Matrizen gegebene mit B . Schließlich enthält der 2-Kink-Ansatz noch die Matrix $g(\sigma^{(\mu)})^\dagger$. Dieser Teil der Wellenfunktion wurde in Abbildung (D.1) mit C dargestellt.

$$g \equiv g^{(A)} \quad g^{(\text{MG1})} \equiv g^{(B)} \quad g(\sigma^{(\mu)})^\dagger \equiv g^{(C)} \quad (\text{D.4})$$

Gemäß Abbildung (D.1) erfordert die Berechnung der Norm fünf Fallunterscheidungen:

- a.) $n' \leq m' < n \leq m$
- b.) $n' < n \leq m' \leq m$
- c.) $n' < n \leq m < m'$
- d.) $n' = n \leq m' < m$
- e.) $n' = n \leq m' = m$

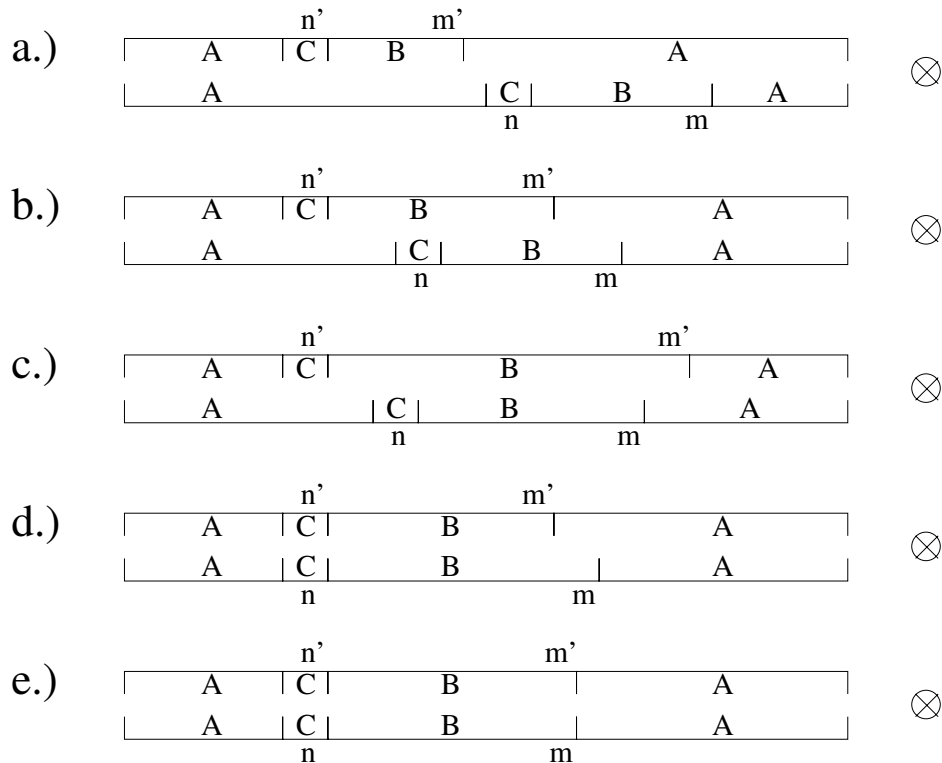


Abbildung D.1: Die in den 4-fach-Summationen der Norm (D.2) auftretenden Fallunterscheidungen. Das Symbol \otimes stellt das Skalarprodukt $\langle n'm'; \mu | n, m; \mu \rangle$ dar. Dabei symbolisieren die oberen Linien die Bra's, die unteren Linien die Ket's.

Berechnung der einzelnen Fälle

Für das weitere Vorgehen müssen zunächst folgende 4×4 Matrizen aufgestellt werden:

$$G_{AA} = G = (g^{(A)})^\dagger \otimes g^{(A)} = \begin{pmatrix} b^2 + a^2 & 0 & 0 & 2a^2 \\ 0 & b^2 - a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b^2 - a^2 & 0 \\ 2a^2 & 0 & 0 & b^2 + a^2 \end{pmatrix} \quad (\text{D.5})$$

$$G_{AB} = (g^{(A)})^\dagger \otimes g^{(B)} = G_{BA} = b \cdot I \quad (\text{D.6})$$

$$G_{AC} = (g^{(A)})^\dagger \otimes g^{(C)} = G_{CA} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\sqrt{2}a^2 & 0 \\ -\sqrt{2}(b^2 - a^2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}(b^2 + a^2) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.7})$$

$$G_{BB} = (g^{(B)})^\dagger \otimes g^{(B)} = I \quad (\text{D.8})$$

$$G_{BC} = (g^{(B)})^\dagger \otimes g^{(C)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}b & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.9})$$

$$G_{CB} = (g^{(C)})^\dagger \otimes g^{(B)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}b & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

$$G_{CC} = (g^{(C)})^\dagger \otimes g^{(C)} = \begin{pmatrix} 4a^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(b^2 + a^2) & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.11})$$

In diesen Gleichungen ist I die 4×4 Einheitsmatrix. Desweiteren benötigt man auch noch die Transformationsmatrix U :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad U^T G_{AA} U = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) \quad (\text{D.12})$$

$$\lambda_1 = b^2 + 3a^2 \stackrel{!}{=} 1, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = |b^2 - a^2| \leq 1 \quad (\text{D.13})$$

Mit den oben definierten Matrizen kann nun das Skalarprodukt $\langle n'm'; \mu | n, m; \mu \rangle$ im Rahmen des Transfermatrixformalismus für die verschiedenen Fälle berechnet werden:

$$a.) : \quad \text{Tr} \left[G_{AA}^{m'-1} G_{CA} G_{BA}^{m'-n'} G_{AA}^{n-m'-1} G_{AC} G_{AB}^{m-n} G_{AA}^{L-m} \right] = \lambda_2^{n-m'} b^{m'-n'+m-n} + \mathcal{O}(\lambda_2^L)$$

$$b.) : \quad \text{Tr} \left[G_{AA}^{m'-1} G_{CA} G_{AB}^{m-n'-1} G_{BC} G_{BB}^{m'-n} G_{AB}^{m-m'} G_{AA}^{L-m} \right] = b^{n-n'+m-m'} + \mathcal{O}(\lambda_2^L)$$

$$c.) : \text{Tr} \left[G_{AA}^{m'-1} G_{CA} G_{AB}^{m-n'-1} G_{BC} G_{BB}^{m-n} G_{AB}^{m'-m} G_{AA}^{L-m'} \right] = b^{n-n'+m'-m} + \mathcal{O}(\lambda_2^L)$$

$$d.) : \text{Tr} \left[G_{AA}^{m'-1} G_{CC} G_{BB}^{m'-n'} G_{AB}^{m-m'} G_{AA}^{L-m} \right] = b^{m-m'} + \mathcal{O}(\lambda_2^L)$$

$$e.) : \text{Tr} \left[G_{AA}^{m-1} G_{CC} G_{BB}^{m-n} G_{AA}^{L-m} \right] = 1 + \mathcal{O}(\lambda_2^L)$$

Die Berechnung der oben auftretenden Spuren im thermodynamischen Limes erfolgt nach Einfügen von Einheitsmatrizen in der Form $I = U^T U$. Die Tatsache, daß die Matrizen G_{AB}, G_{BA}, G_{BB} Diagonal-Form besitzen, ermöglicht die Berechnung der Spuren mit der Transformationsmatrix U (U ist die Transformationsmatrix von G_{AA} !).

Summationen

Gemäß Abbildung (D.1) ergeben sich folgende 4-fach Summationen für die Fälle a.) - e.):

$$\begin{aligned} a.) : N_a &= \sum_{m=n}^L \sum_{n=m'+1}^L \sum_{m'=n'}^L \sum_{n'=1}^L \lambda_2^{n-m'} b^{m'-n'+m-n} e^{iq_1(m-m')+iq_2(n-n')+(n'-m'+n-m)/\xi} \\ &= \lambda_2 \frac{e^{i(q_1+q_2)+2/\xi}}{(e^{1/\xi} - be^{iq_1})(e^{1/\xi} - be^{iq_2})(1 - \lambda_2 e^{i(q_1+q_2)})} \quad (L \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b.) : N_b &= \sum_{m=m'}^L \sum_{m'=n}^L \sum_{n=n'+1}^L \sum_{n'=1}^L b^{n-n'+m-m'} e^{iq_1(m-m')+iq_2(n-n')+(n'-m'+n-m)/\xi} \\ &= b \frac{e^{iq_2+3/\xi}}{(e^{1/\xi} - be^{iq_1})(e^{1/\xi} - be^{iq_2})(e^{2/\xi} - 1)} \quad (L \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c.) : N_c &= \sum_{m'=m+1}^L \sum_{m=n}^L \sum_{n=n'+1}^L \sum_{n'=1}^L b^{n-n'+m'-m} e^{iq_1(m-m')+iq_2(n-n')+(n'-m'+n-m)/\xi} \\ &= b^2 \frac{e^{iq_2+2/\xi}}{(e^{iq_1+1/\xi} - b)(e^{1/\xi} - be^{iq_2})(e^{2/\xi} - 1)} \quad (L \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d.) : N_d &= \sum_{m=m'+1}^L \sum_{m'=n}^L \sum_{n=1}^L b^{m-m'} e^{iq_1(m-m')+(2n-m'-m)/\xi} \\ &= b \frac{e^{iq_1+2/\xi}}{(e^{1/\xi} - be^{iq_1})(e^{2/\xi} - 1)} \quad (L \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} e.) : N_e &= \sum_{m=n}^L \sum_{n=1}^L e^{2(n-m)/\xi} \\ &= \frac{e^{2/\xi}}{(e^{2/\xi} - 1)} \quad (L \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

Addition der einzelnen Fälle

Abschließend müssen die Fälle a.) - e.) addiert werden:

$$\langle \psi_\mu(k, q) | \psi_\mu(k, q) \rangle = N_a + N_a^* + N_b + N_b^* + N_c + N_c^* + N_d + N_d^* + N_e \quad (\text{D.14})$$

Die komplex konjugierten Anteile in (D.14) resultieren aus den Fällen a.) - d.) durch Vertauschen von $n \leftrightarrow n'$ und $m \leftrightarrow m'$.

Anmerkung

Die Berechnung des Erwartungswertes $\langle \psi_\mu(k, q) | \tilde{H} | \psi_\mu(k, q) \rangle$ erfolgt analog zur Berechnung der Norm. Es ist jedoch zu bedenken, daß man mehr Fallunterscheidungen berücksichtigen muß. Gemäß (4.25) ist der Hamilton-Operator H bzw. \tilde{H} eine Summe lokaler Operatoren $H_{l', l'+1}$. Je nachdem, an welchen Plätzen $H_{l', l'+1}$ auf $|n, m, \mu\rangle$ wirkt, ergeben sich unterschiedliche Beiträge zur 4-fach Summation in (D.3). Beispielsweise spaltet sich der Fall a.) in 14 weitere Fälle auf:

$$\begin{aligned}
 a_{1.}) \quad l' > m & & a_{2.}) \quad l' = m, m > n & & a_{3.}) \quad n < l' \leq m - 1, m > n + 1 \\
 a_{4.}) \quad l' = n, m > n & & a_{5.}) \quad l' = n, m = n & & a_{6.}) \quad l' = n - 1, n > m' + 1 \\
 a_{7.}) \quad l' = n - 1 = m', n = m' + 1 & & a_{8.}) \quad m' < l' \leq n - 2, n > m' + 2 \\
 a_{9.}) \quad l' = m', n > m' + 1, m' > n' & & a_{10.}) \quad n' < l' < m' - 1 \\
 a_{11.}) \quad l' = n', m' > n' & & a_{12.}) \quad l' = n', m' = n', n > n' + 1 \\
 a_{13.}) \quad l' = n', m' = n', n = n' + 1 & & a_{14.}) \quad l' = n' - 1 .
 \end{aligned}$$

Analog zu Fall a.) spalten sich auch die Fälle b.) - e.) durch die Wirkung des lokalen Hamilton-Operators auf. Insgesamt sind 41 Fälle zu unterscheiden. Zusätzlich zu den Matrizen (D5) - (D12) benötigt man die Matrizen $H_{AA,AA}$, $H_{AA,BA}$, $H_{AA,BB}$, $H_{AA,CB}$ etc., welche die Information über die lokale Wirkung des Hamilton-Operators enthalten. Diese Matrizen sind durch

$$(H_{X'Y',XY})_{(i_1,j_1),(i_2,j_2)} = \left((g_{l'}^{(X')})^\dagger (g_{l'+1}^{(Y')})^\dagger \right)_{i_1,i_2} \otimes \left[H_{l',l'+1} \left(g_{l'}^{(X)} g_{l'+1}^{(Y)} \right)_{j_1,j_2} \right] \quad (\text{D.15})$$

definiert.

Literaturverzeichnis

- [1] H. Bethe, *Z. Phys.* **71** (1931) 205.
- [2] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49** (1928) 619.
- [3] L. Huthén, *Arkiv Met. Astron. Fysik* **26A** (1938) Na. 11.
- [4] J. Des Cloizeaux und J. J. Pearson, *Phys. Rev.* **128** (1962) 2131.
- [5] L. D. Faddeev und L. A. Takhtajan, *Phys. Lett.* **85A** (1981) 375.
- [6] J. D. Johnson, S. Krinsky und B. M. McCoy, *Phys. Rev. A* **8** (1973) 2526.
- [7] J. Villain, *Physica* **79B** (1975) 1.
- [8] N. Ishimura und H. Shiba, *Prog. Theo. Phys.* **63** (1980) 743.
- [9] E. Lieb, T. Schultz, D. C. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16** (1961) 407;
I. Affleck und E. Lieb, *Lett. Math. Phys.* **12** (1986) 57.
- [10] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983) 1153;
F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A*, **93** (1983) 464.
- [11] J. M. Kosterlitz und D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6** (1973) 1181;
J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7** (1974) 1046.
- [12] R. R. P. Singh und M. E. Fisher, R. Shankar, *Phys. Rev. B* **39** (1989) 2562.
- [13] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 799;
I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb und H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.*, **115** (1988) 477.
- [14] C. K. Majumdar und D. K. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1399.
- [15] E. Dagotto und T. M. Rice, *Science* **271** (1996) 618.
- [16] D. V. Khveshchenko, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 380.
- [17] S. Dell'Aringa, E. Ercolessi, G. Morandi, P. Pieri und M. Roncaglia, *Phys. Rev. Lett* **78** (1997) 2457.
- [18] S. R. White, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 52.
- [19] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. B* **25** (1982) 4925.
- [20] T. Tonegawa und I. Harada, *J. Phys. Soc. Japan* **56** (1987) 2153.
- [21] O. Kahn, Y. Pei und Y. Journaux, *Inorganic Materials* von D. W. Bruce und D. O'Hara (Wiley) (1992).
- [22] M. Verdaguer, A. Gleizes, J. P. Renard und J. Seiden, *Phys. Rev. B* **29** (1984) 5144.

- [23] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I*, Springer Series in Solid State Sciences 17 (1981).
- [24] R. R. P. Singh, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 11582.
- [25] B. S. Shastry und B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 964.
- [26] J. Goldstone, A. Salam und S. Weinberg, *Phys. Rev.* **127** (1962) 965.
- [27] L. D. Faddeev und L. A. Takhtadzhyan, *J. Sov. Math.* **24** (1984) 241.
- [28] Y. Pei, O. Kahn, J. Sletten, J. P. Renard, R. Georges, J. C. Gianduzzo, J. Curely und X. Qiang, *Inorg. Chem.* **27** (1988) 47.
- [29] H. J. de Vega und F. Woynarovich, *J. Phys. A* **25** (1992) 4499;
H. J. de Vega, L. Mezincescu und R. I. Nepomechie, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 13223.
- [30] M. Drillon, J. C. Gianduzzo und R. Georges, *Phys. Lett.* **96A** (1983) 413.
- [31] S. Brehmer, H.-J. Mikeska und S. Yamamoto, *J. Phys. C* **9** (1997) 3921.
- [32] A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska und S. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **55** (1997) R3336.
- [33] S. K. Pati, S. Ramasesha und D. Sen, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 8894.
- [34] S. Yamamoto, S. Brehmer und H.-J. Mikeska, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 13610.
- [35] S. Yamamoto, T. Fukui, K. Maisinger und U. Schollwöck, *Preprint: cond-mat/9806344* (1998).
- [36] K. Maisinger, U. Schollwöck, S. Brehmer, H.-J. Mikeska, S. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **58** (1998) R5908.
- [37] E. Lieb und D. C. Mattis, *J. Math. Phys.* **3** (1962) 749.
- [38] T. Holstein und H. Primakoff, *Phys. Rev.* **58** (1940) 1048.
- [39] U. Neugebauer, *Doktorarbeit*, Universität Hannover (1997).
- [40] R. Botet und R. Jullien, *Phys. Rev. B* **27** (1983) 613;
R. Botet, R. Jullien und M. Kolb, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 3914.
- [41] H. W. J. Blöte und M. P. Nightingale *Phys. Rev. B* **33** (1986) 659.
- [42] M. Takahashi, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 5188.
- [43] K. Kubo, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 866.
- [44] S. R. White und R. M. Noack, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 3487.
- [45] O. Golinelli, T. Jolicoeur und R. Lacaze, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 303.
- [46] G. Fáth und J. Sólyom, *J. Phys. C* **5** (1993) 8983.
- [47] U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, *Z. Phys. B* **99** (1996) 151.
- [48] G. Gómez-Santos, *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 790.
- [49] N. Elstner und H.-J. Mikeska, *Z. Phys. B* **89** (1992) 321.

- [50] H.-J. Mikeska, *Europhys. Lett.* **19** (1992) 39.
- [51] M. Den Nijs und K. Rommelse, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 4709.
- [52] T. Kennedy und H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **147** (1992) 431.
- [53] N. Elstner und H.-J. Mikeska, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 3907.
- [54] U. Schollwöck, O. Golinelli und T. Jolicoeur, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 4038;
U. Schollwöck und T. Jolicoeur, *Europhys. Lett.* **30** (1995) 493.
- [55] S. Yamamoto, *Phys. Lett. A* **213** (1996) 102.
- [56] K. Hallberg, X. Q. G. Wang, P. Horsch und A. Moreo, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 4955.
- [57] S. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 3348.
- [58] M. P. Gelfand, R. R. P. Singh und D. A. Huse, *J. Stat. Phys.* **59** (1990) 1093;
M. P. Gelfand, *Solid State Commun.* **98** (1996) 11.
- [59] P. M. Morse und H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill (1953).
- [60] M. P. Gelfand und R. R. P. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2133.
- [61] M. P. Gelfand und R. R. P. Singh, D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2484.
- [62] C. Domb und M. S. Green, *Phase Transitions and Critical Phenomena Vol. 3*, Academic Press (1974).
- [63] G. A. Baker Jr und J. L. Gammel, *The Padé Approximant in Theoretical Physics*, Academic Press (1970).
- [64] M. E. Fisher und H. Au-Yang, *J. Phys. A* **12** (1979) 1677.
- [65] D. L. Hunter und G. A. Baker Jr, *Phys. Rev. B* **19** (1979) 3808.
- [66] Y. A. Izyumov und Y. N. Skryabin, *Statistical Mechanics of Magnetically Ordered Systems*, Plenum Publishing Corporation (1988).
- [67] S. R. White und D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 3844.
- [68] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982);
M. Jimbo und T. Miwa, *Algebraic Analysis of Solvable Lattice Models*, Conference Board of the Mathematical Sciences Nr.85, Am. Math. Society (1995).
- [69] P. Pfeuty, *Ann. Phys.* **57** (1970) 79.
- [70] H.-J. Mikeska, private Mitteilung (1994).
- [71] S. Itoh et al., *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 2375.
- [72] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen und S. Ramasesha, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 6581.
- [73] S. Brehmer, U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, *J. Phys. C* **8** (1996) 7161.
- [74] S. R. White und I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54** (1996) 9862.

- [75] T. Tonegawa und I. Harada, *Recent Advances in Magnetism of Transition Metal Compounds* von A. Kotani und N. Suzuki, Singapore: World Scientific (1993).
- [76] S. Eggert, *Phys. Rev. B* **54** (1996) R9612.
- [77] R. Hirsch, *Diplomarbeit*, Universität Köln (1988).
- [78] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano und Y. Bando, *J. Solid State Chem.* **95** (1991) 230.
- [79] R. S. Eccleston, T. Barnes, J. Brody und J. W. Johnson, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 2626.
- [80] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera und E. S. Swanson, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 3196;
T. Barnes und J. Riera, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 6817.
- [81] S. Gopalan, T. M. Rice und M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 8901.
- [82] S. R. White, R. M. Noack und D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 886.
- [83] S. Brehmer, A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska und U. Neugebauer, *J. Phys. C* **10** (1998) 1103.
- [84] I. Affleck, *Preprint: cond-mat/9705127* (1997).
- [85] M. Fannes, B. Nachtergaele und R. F. Werner, *Europhys. Lett.* **10** (1989) 633;
M. Fannes, B. Nachtergaele und R. F. Werner, *Commun. Math. Phys.* **144** (1992) 443.
- [86] A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, *J. Phys. A* **24** (1991) L955;
A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, *Z. Phys. B* **87** (1992) 281;
A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz, *Europhys. Lett.* **24** (1993) 293.
- [87] U. Schollwöck, T. Jolicoeur und T. Garel, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 3304.
- [88] Y. Nishiyama, N. Hatano und M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* **64** (1995) 1967.
- [89] S. Takada und H. Watanabe, *J. Phys. Soc. Japan* **61** (1992) 39.
- [90] H. Watanabe, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 12508.
- [91] W. J. Caspers und W. Magnus, *Phys. Lett.* **88A** (1982) 103.
- [92] C. Zeng und J. B. Parkinson, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 11609.
- [93] Y. Fan und M. Ma, *Phys. Rev. B* **37** (1988) 1820.
- [94] G. Bouzerar, A. P. Kampf und F. Schönfeld, *Preprint: cond-mat/9701176* (1997).
- [95] J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **47** (1969) 2621;
J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48** (1970) 1724;
J. Stephenson, *Can. J. Phys.* **48** (1970) 2118;
J. Stephenson, *J. Math. Phys.* **12** (1970) 420.
- [96] T. Garel und J. M. Maillard, *J. Phys. C* **19** (1986) L505.
- [97] R. J. Bursill, G. A. Gehring, D. J. J. Farnell, J. B. Parkinson, C. Zeng, T. Xiang, *J. Phys. C* **7** (1995) 8605.

- [98] T. Nakamura, S. Takada, K. Okamoto und N. Kurosava, *J. Phys. C* **9** (1997) 6401.
- [99] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press (1965).
- [100] J. Piekarewicz und J. R. Shepard, *Preprint: cond-mat/9804261* (1998).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. H.-J. Mikeska für die Vergabe des Themas und die ausgezeichnete Betreuung bedanken.

Seine Art, mich für physikalische Fragestellungen zu begeistern sowie die stetige Unterstützung ließen eine herzliche Arbeitsatmosphäre entstehen. Einen besonderen Dank möchte ich Professor Mikeska für die Ermöglichung der Teilnahme an interessanten Sommerschulen und Workshops aussprechen.

Weiterhin danke ich Alexei Kolezhuk für viele aufschlußreiche Diskussionen und die fruchtbare Zusammenarbeit.

Bei den Herren Christian Waldtmann, Ulrich Neugebauer und Claus Rödenbeck möchte ich mich für zahlreiche interessante Gespräche und ihren Rat bei numerischen Problemen bedanken.

Lebenslauf

Geburtsdatum/-ort 09.11.67 in Wuppertal

Schulbildung Wilhelm Busch Grundschule in Soltau
9/1974 – 6/1978
Gymnasium Soltau
9/1978 – 6/1984
American Fork High School, Utah, USA
9/1984 – 6/1985
Gymnasium Soltau
9/1985 – 6/1988 Abschluß mit Abitur 6/1988

Wehrdienst 7/1988 – 9/1989

Studium Studium der Physik an der Universität Karlsruhe
10/1989 – 3/1992
Studium der Physik an der Universität Hannover
4/1992 – 3/1995
Abschluß mit Diplom 16.3.1995
Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische
Physik der Universität Hannover seit 1.4.1995

Veröffentlichungen S. Brehmer, U. Neugebauer und H.-J. Mikeska, *J. Phys. C* **8**
(1996) 7161.
S. Brehmer, H.-J. Mikeska und S. Yamamoto, *J. Phys. C* **9**
(1997) 3921.
S. Brehmer, A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska und U. Neugebauer,
J. Phys. C **10** (1998) 1103.
S. Yamamoto, S. Brehmer und H.-J. Mikeska, *Phys. Rev. B* **57**
(1998) 13610.
K. Maisinger, U. Schollwöck, S. Brehmer, H.-J. Mikeska, S.
Yamamoto, *Phys. Rev. B* **58** (1998) R5908.

