

Untersuchung von Solitonen in
Spin-Peierls-Systemen mit Hilfe der
Dichtematrix-Renormierungsgruppe

Diplomarbeit

vorgelegt von

Boris Marić

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Oktober 1999

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Spin-Peierls-Systeme	7
2.1	Der Spin-Peierls-Phasenübergang	7
2.2	Theoretische Beschreibung	8
2.3	CuGeO ₃	10
2.3.1	Kristallstruktur	10
2.3.2	Entdeckung des Spin-Peierls-Übergangs in CuGeO ₃	12
2.3.3	Modellhamiltonoperator	13
2.3.4	Magnetischer Austausch in CuGeO ₃	15
2.3.5	Die verschiedenen Phasen von CuGeO ₃	19
3	Dichtematrix-Renormierung	25
3.1	Renormierungs-idee	25
3.2	Renormierung mit Hilfe der Dichtematrix	27
3.2.1	Wahl einer optimalen Basis	27
3.2.2	Der Infinite-Size-Algorithmus	31
3.2.3	Der Finite-Size-Algorithmus	32
3.2.4	Erwartungswerte	34
3.3	Implementierung	35
4	Anwendung: Inkommensurabel modulierte Spin-Peierls-Systeme	37
4.1	Iterative Bestimmung der Modulationen	38
4.2	Bezug zur antiadiabatischen Phononenbehandlung	47
4.3	Einfluß einer Zwischenkettenkopplung	50
4.4	Einfluß einer elastischen Dispersion	57
4.5	Einfluß einer Zwischenkettenfrustration	58
4.6	Bezug zu CuGeO ₃	61

4.7	Numerische Details	64
5	Zusammenfassung	65
A	SVD-Zerlegung einer Matrix	69
B	Simulationsergebnisse	71

Kapitel 1

Einleitung

Spinsysteme stellen ein sehr reichhaltiges Feld der theoretischen Festkörperphysik dar. Viele isolierende Festkörper mit interessanten magnetischen Eigenschaften lassen sich durch einen effektiven Hamiltonoperator beschreiben, der allein durch Spinvariablen S_i ausgedrückt werden kann, den sogenannten Heisenberg-Hamiltonian

$$H_{\text{Heis}} = \sum_{i=1}^N J_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

Die Spins sind hierbei auf einem Gitter angeordnet, und die Spinoperatoren wirken in einem Hilbertraum, der als Tensorprodukt der N Einteilchen-Hilberträume der einzelnen Spins aufzufassen ist. Im allgemeinen wird durch Gleichung 1.1 ein dreidimensionales System beschrieben, da die Spins den Gitterplätzen eines dreidimensionalen Kristalls zugeordnet werden. In einigen Materialien liegt jedoch eine stark anisotrope Wechselwirkung $J_{i,j}$ vor, so daß man den Austausch in einer oder gar zwei Raumrichtungen vernachlässigen kann. Neben der Tatsache, daß die Reduktion der Dimension eine wesentliche Vereinfachung sowohl für analytische als auch für numerische Untersuchungen bedeutet, wird die Betrachtung von ein- bzw. zweidimensionalen Spinsystemen so auch durch die Anwendbarkeit auf reale Systeme motiviert.

Die in dieser Arbeit betrachtete Substanz CuGeO_3 ist ein besonders prominentes Beispiel für ein System, das durch einen Hamiltonian der Form 1.1 beschrieben werden kann. Es handelt sich hier um einen quasi-eindimensionalen Antiferromagneten, bei dem in Kettenrichtung nur die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn und die zwischen übernächsten Nachbarn („Frustration“) relevant ist. Die Eindimensionalität ist zwar in guter Näherung erfüllt, jedoch haben Zwischenkettenkopplungseffekte einen sichtbaren Einfluß auf die Eigenschaf-

ten des Systems. Das besondere Interesse an CuGeO_3 ist dadurch bedingt, daß hier eine Kopplung des Spinsystems an die Gitterschwingungen vorliegt. Diese Spin-Phonon-Kopplung kommt durch die Abhängigkeit der magnetischen Wechselwirkung zweier benachbarter Spins vom Winkel der für die Wechselwirkung verantwortlichen Bindung zustande (vgl. Abschnitt 2.3.4). Sie bewirkt bei Absenken der Temperatur den sogenannten Spin-Peierls-Phasenübergang, bei dem die zunächst äquidistant liegenden Spins alternierend von ihren ursprünglichen Positionen ausgelenkt werden („Dimerisierung“). CuGeO_3 war die erste anorganische Substanz, an der dieses Phänomen beobachtet wurde [1]. Obwohl vorher schon einige organische Spin-Peierls-Substanzen bekannt waren, bedeutete die Entdeckung einen Durchbruch auf diesem Gebiet, da CuGeO_3 -Kristalle hoher Qualität bedeutend präzisere Messungen erlauben.

Formal hat Gleichung 1.1 eine sehr einfache Struktur. Die Größe des zugehörigen Hilbertraums läßt jedoch alle Versuche, durch Matrixdiagonalisierung die Zustände und Energien für realistische Teilchenzahlen zu erhalten, scheitern. So kann z.B. eine Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergkette, in der nur eine Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn auftritt, mittels exakter Lanczos-Diagonalisierung, begrenzt durch die heutzutage zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten, nur bis zu einer Länge von etwa $L = 30$ behandelt werden.

Ein entscheidender Fortschritt für die numerische Untersuchung von eindimensionalen Spinsystemen gelang Steven R. White (1992) mit der Entwicklung der Dichtematrix Renormierungsgruppen (DMRG) Methode. Diese erlaubt es, den Grundzustand und niedrige angeregte Zustände solcher Systeme mit einigen hundert Gitterplätzen zu behandeln, und ist anderen numerischen Methoden, wie Quanten-Monte-Carlo oder Lanczosverfahren an Effizienz und Genauigkeit weit überlegen.

In der vorliegenden Arbeit werden Spin-Peierls-Ketten mit DMRG-Methoden untersucht. Die Arbeit gliedert sich in vier Teile. Im zweiten Kapitel wird eine Übersicht zu bekannten experimentellen und theoretischen Erkenntnissen über Spin-Peierls-Systeme gegeben, wobei in einem eigenen Abschnitt speziell auf CuGeO_3 eingegangen wird. Im darauffolgenden Kapitel wird auf das Konzept der numerischen Dichtematrixrenormierung eingegangen und die Implementierung eines DMRG-Algorithmus erläutert. Im letzten Kapitel werden numerische Resultate für inkommensurabel modulierte Spinketten diskutiert, die mittels DMRG erhalten wurden, und mit für CuGeO_3 bekannten experimentellen Tatsachen verglichen.

Kapitel 2

Spin-Peierls-Systeme

2.1 Der Spin-Peierls-Phasenübergang

Bei Spin-Peierls-Substanzen handelt es sich um quasi-eindimensionale Spin- $\frac{1}{2}$ -Antiferromagnete mit Kopplung der Spinfreiheitsgrade an die Freiheitsgrade des dreidimensionalen Phononensystems. Bei Unterschreiten einer kritischen Temperatur T_{SP} setzt bei diesen Systemen eine spontane Gitterverzerrung ein. Es handelt sich um einen Phasenübergang zweiter Ordnung von der sogenannten U-Phase (unverzerrte Phase) in eine dimerisierte Phase (D-Phase). Während die Gleichgewichtspositionen der einzelnen Spins in der uniformen Phase äquidistant liegen, ist der Abstand zwischen benachbarten Gitterplätzen in der D-Phase abwechselnd um einen festen Betrag Δu vergrößert bzw. verringert. Als Ordnungsparameter für diesen Phasenübergang kann der Betrag der Auslenkung der Spins aus den Gleichgewichtspositionen, die sie in der U-Phase einnehmen, betrachtet werden. Diese Auslenkung beginnt bei Absenken der Temperatur unterhalb von T_{SP} stetig von Null auf einen Maximalwert bei $T = 0$ anzusteigen. Eine dritte Phase, die sogenannte I-Phase (inkommensurable Phase) tritt bei Einschalten eines überkritischen Magnetfeld auf. In dieser Phase liegt eine von Gitterplatz zu Gitterplatz variierende Auslenkung der Spins von ihren Gleichgewichtspositionen vor. Abbildung 2.1 zeigt das für Spin-Peierls-Systeme typische Phasendiagramm. In Abschnitt 2.3.5 wird auf diese Situation am Beispiel von CuGeO_3 noch einmal ausführlicher eingegangen.

Der erste experimentelle Nachweis für einen Spin-Peierls-Übergang gelang Bray und Mitarbeitern [3, 4] an den organischen Substanzen $\text{TTFCuS}_4\text{C}_4(\text{CF}_3)_4$ und TTFCuBDT . Ein Spin-Peierls-Übergang in einer anorganischen Substanz (CuGeO_3) konnte zum erstenmal von Hase et al. nachgewiesen werden [1] (vgl. Ab-

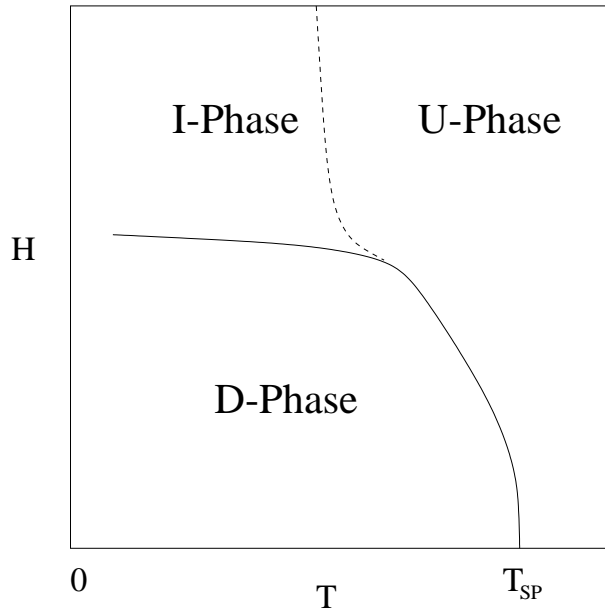


Abbildung 2.1: Für Spin-Peierls-Systeme typisches Phasendiagramm. [2]

schnitt 2.3.2). Die einzige anorganische Substanz neben CuGeO_3 , von der vermutet wird, daß es sich um ein Spin-Peierls-System handelt, ist das α' - NaV_2O_5 [5, 6].

2.2 Theoretische Beschreibung

Der Hamiltonoperator zur Beschreibung eines Spin-Peierls-Systems besteht im einfachsten Fall aus zwei Anteilen, einem für die antiferromagnetisch gekoppelten Spins und einem für das Phononensystem

$$H = H_m + H_B \quad (2.1)$$

mit

$$H_m = \sum_{i=1}^N J(\vec{u}_i, \vec{u}_{i+1}) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.2)$$

$$H_B = \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}}. \quad (2.3)$$

Der erste Anteil H_m ist der magnetische Anteil, der die Wechselwirkung der längs einer Kette angeordneten Spins beinhaltet. Der Index i durchläuft die N Gitter-

plätze und das Austauschintegral $J(\vec{u}_i, \vec{u}_{i+1})$ bestimmt die Nächstnachbarwechselwirkung. Langreichweitigere Spin-Spin-Wechselwirkungen wurden hier nicht mitaufgeführt. Es sei jedoch darauf hingewiesen, daß etwa in CuGeO_3 auch eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn (Frustration) eine wesentliche Rolle spielt, so daß man hier einen Term der Form $\sum \alpha J \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2}$ hinzufügen muß (vgl. Abschnitt 2.3.3). Die Nächstnachbarwechselwirkung ist von der Auslenkung benachbarter Spins von ihren Gitterplätzen \vec{u}_i abhängig (vgl. 2.3.4), was zu der für Spin-Peierls-Systeme charakteristischen Kopplung des Phononensystems an das Spinsystem führt. Der zweite Anteil H_B ist der Hamiltonian des reinen Phononensystems. Hierbei ist $\{\vec{q}\}$ die Menge aller erlaubten Phononenimpulse, $\omega(\vec{q})$ die Energie des Phonons mit Impuls \vec{q} , und $b_{\vec{q}}^\dagger$ bzw. $b_{\vec{q}}$ stehen für die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren eines Phonons mit dem Impuls \vec{q} . Der Zusammenhang zwischen den Auslenkungen u_i und den Erzeugern bzw. Vernichtern lautet

$$\vec{u}_i = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{\vec{q}} \vec{e}_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}_i} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}}} (b_{\vec{q}}^\dagger + b_{-\vec{q}}) . \quad (2.4)$$

M steht für die Masse der Gitterionen und $\vec{e}_{\vec{q}}$ ist der Polarisationsvektor des Phonons zum Wellenvektor \vec{q} . Der Einfachheit halber gehen wir hier von einem Gitter mit einfacher Basis aus. Im Falle einer mehratomigen Basis muß der Index \vec{q} durch $(\vec{q}\lambda)$ ersetzt werden, wobei der Index λ die verschiedenen linear unabhängigen Schwingungszustände der Basis numeriert.

In vielen Fällen (insbesondere auch in CuGeO_3 , vgl. 2.3.4) kann davon ausgegangen werden, daß die magnetische Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn $J(\vec{u}_i, \vec{u}_{i+1})$ nur von der Differenz der Auslenkungen \vec{u}_i, \vec{u}_{i+1} abhängt. Nimmt man zusätzlich an, daß die Auslenkungen klein sind, so bietet es sich an, $J(\vec{u}_i, \vec{u}_{i+1})$ zu entwickeln

$$J(\vec{u}_i, \vec{u}_{i+1}) = J + \vec{\gamma}(\vec{u}_i - \vec{u}_{i+1}) . \quad (2.5)$$

Der magnetische Anteil des Spin-Peierls-Hamiltonians läßt sich so in einen reinen Spinanteil H_S und einen Anteil H_{SB} , der die Spin-Phononkopplung beschreibt, zerlegen

$$H_S = \sum_i J \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \quad (2.6)$$

$$H_{SB} = \sum_{i\vec{q}} \vec{\gamma} \vec{e}_{\vec{q}} (e^{i\vec{q}\vec{r}_i} - e^{i\vec{q}\vec{r}_{i+1}}) \frac{b_{\vec{q}}^\dagger + b_{-\vec{q}}}{\sqrt{2MN\omega_{\vec{q}}}} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} . \quad (2.7)$$

Durch Fouriertransformation der Spinoperatoren $\mathbf{S}_i = 1/\sqrt{N} \sum e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \mathbf{S}_{\vec{k}}$ erhält man den Standardausdruck für die Spin-Phononkopplung im Impulsraum:

$$H_{\text{SB}} = \sum_{\vec{q}} A_{\vec{q}} (b_{\vec{q}}^\dagger + b_{-\vec{q}}), \quad (2.8)$$

wobei

$$A_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} g(\vec{q}, \vec{k}) \mathbf{S}_{\vec{k}} \mathbf{S}_{-\vec{k}-\vec{q}}. \quad (2.9)$$

Der Faktor $g(\vec{q}, \vec{k})$ charakterisiert die Kopplung des Spinsystems an die Phononen. Explizit gilt

$$g(\vec{q}, \vec{k}) = \vec{e}_{\vec{q}} \vec{\gamma} \frac{1}{2\sqrt{MN}\omega_{\vec{q}}} e^{i\vec{k}\vec{c}} (1 - e^{i\vec{q}\vec{c}}), \quad (2.10)$$

wobei \vec{c} ein Vektor ist, der in Richtung der Ketten zeigt und dessen Länge dem Abstand der Spins in Kettenrichtung entspricht.

Eine nichtkonstante Dispersion $\omega_{\vec{q}}$ ist hier eine Voraussetzung dafür, daß der Anteil H_{SB} für die Spin-Phononkopplung dreidimensional ist. Die Dreidimensionalität der Phononen ist wiederum notwendig für die Existenz eines Spin-Peierls-Phasenüberganges bei einer endlichen Temperatur, da rein eindimensionale Systeme nach dem Mermin-Wagner-Theorem bei endlichen Temperaturen niemals langreichweitige Ordnung zeigen können (vgl. z.B. [7]).

2.3 CuGeO₃

1993 wurde zum erstenmal von einem Spin-Peierls-Übergang in einem anorganischen Material berichtet [1]. M. Hase und Mitarbeiter hatten Suszeptibilitätsmessungen an CuGeO₃ durchgeführt und konnten anhand dieser klar nachweisen, daß es sich hierbei um eine Spin-Peierls-Substanz handelt (vgl. Abschnitt 2.3.2). Im Gegensatz zu den bis dahin bekannten organischen Substanzen läßt sich CuGeO₃ in großen Einkristallen herstellen, so daß sich durch diese Entdeckung neue experimentelle Möglichkeiten zur Untersuchung eines Spin-Peierls-Systems eröffneten (für eine Übersicht siehe Referenz [8]).

2.3.1 Kristallstruktur

Abb. 2.2 zeigt die Kristallstruktur von CuGeO₃ [9, 10]. Charakteristisch sind die CuO₆-Oktaeder mit den Cu²⁺-Ionen im Zentrum, die entlang der c-Achse angeordnet sind. An den sechs Ecken dieser Oktaeder befinden sich Sauerstoffatome.

Die Sauerstoffatome an den zwei Spitzen der CuO_6 -Oktaeder werden mit O(1) bezeichnet, die restlichen vier Sauerstoffatome, die in der Basalebene der Oktaeder liegen, mit O(2). Je zwei in c-Richtung benachbarte Oktaeder haben zwei O(2)-Sauerstoffatome gemeinsam. Die Oktaeder sind stark verzerrt. Der Abstand vom Cu^{2+} -Ion zu den O(2)-Atomen ist etwa 30% kleiner als der Abstand zu den O(1)-Atomen. Desweiteren beträgt der für die magnetische Wechselwirkung zwischen längs der c-Achse benachbarten Cu^{2+} -Ionen entscheidende Cu-O(2)-Cu-Winkel etwa 98° (vgl. Abschnitt 2.3.4). Ein weiterer Bestandteil der Kristall-

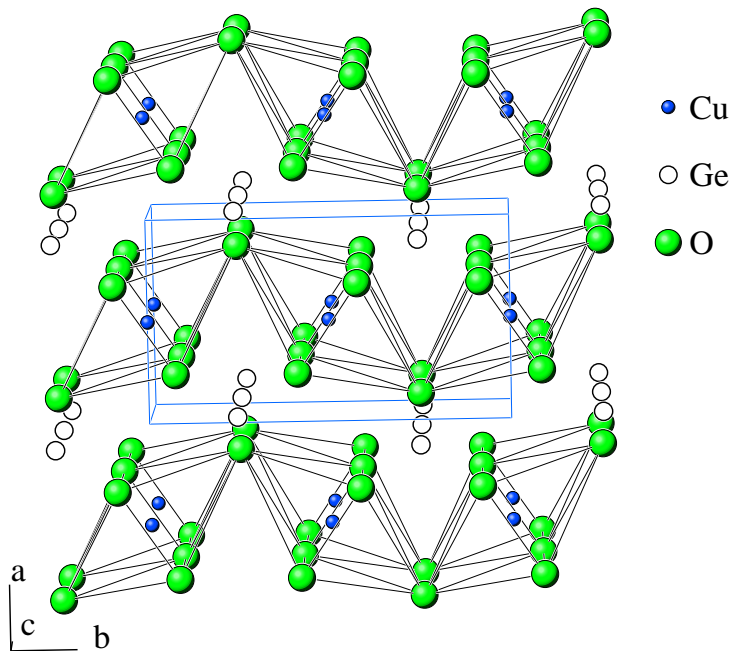


Abbildung 2.2: Kristallstruktur von CuGeO_3 [10]. Die Einheitszelle ist durch den eingezeichneten Quader hervorgehoben.

struktur sind die GeO_3 -Tetraeder, die zwischen den in a-Richtung benachbarten CuO_6 -Oktaedern liegen. Die magnetischen Eigenschaften von CuGeO_3 sind auf die Cu^{2+} -Ionen zurückzuführen, die einen Spin von $S = \frac{1}{2}$ tragen. Die c-Achse entspricht der Kettenrichtung. Der quasi-eindimensionale magnetische Charakter von CuGeO_3 ist darauf zurückzuführen, daß die magnetische Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins, die auf derselben Kette liegen, die Wechselwirkung zwischen Spins, die auf verschiedenen Ketten liegen, weit überwiegt (vgl. Ab-

schnitt 2.3.4).

2.3.2 Entdeckung des Spin-Peierls-Übergangs in CuGeO₃

Der Verlauf der Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität von CuGeO₃ (vgl. Abb. 2.3) war der erste Hinweis darauf, daß es sich bei CuGeO₃ um eine Spin-Peierls-Substanz handelt [1]. Die hervorstechenden Merkmale der von Hase et al. gemessenen Suszeptibilitätskurven sind der exponentielle Abfall von $\chi(T)$ unterhalb einer bestimmten Temperatur $T_{SP} \simeq 14\text{K}$ und das breite Maximum bei einer Temperatur von ca. 56K. Das Verhalten oberhalb von T_{SP} ähnelt dem eines eindimensionalen Heisenberg-Antiferromagneten mit konstanter Austauschwechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn. Zum Vergleich ist in Abb. 2.3 neben den gemessenen Suszeptibilitätskurven die exakt bekannte Suszeptibilität [11] für ein solches System eingezeichnet, wobei die Austauschkonstante so gewählt wurde, daß das Maximum an derselben Stelle liegt wie bei den experimentellen Kurven. Die quantitative Übereinstimmung ist schlecht, was als Indiz für die Existenz einer Frustration gewertet werden kann [12, 13, 14]. Der Verlauf der Suszeptibilität unterhalb der kritischen Temperatur ist im zweiten

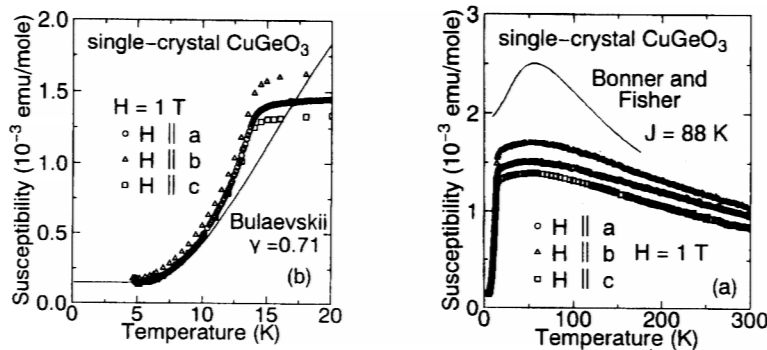


Abbildung 2.3: Suszeptibilitätskurven aus Referenz [1].

Teil von Abb. 2.3 zu sehen. Die Kurve beginnt unterhalb von T_{SP} exponentiell abzuklingen. Dieses Verhalten weist auf einen unmagnetischen Grundzustand und eine Energielücke zwischen diesem und der ersten Anregung im magnetischen Energiespektrum hin. Dies sind charakteristische Eigenschaften, die ein eindimensionaler Spin-1/2 Heisenberg-Antiferromagnet mit alternierender Austauschwechselwirkung aufweist. Aus diesen Überlegungen folgerten Hase et al., daß CuGeO₃ bei Unterschreiten von T_{SP} durch eine Gitterverzerrung in eine di-

merisierte Phase übergeht. Um auszuschließen, daß es sich hierbei um einen rein strukturellen Phasenübergang handelt, untersuchten die genannten Autoren die Magnetfeldabhängigkeit der Übergangstemperatur und zeigten, daß diese mit der bis dahin bekannten Theorie [2] für den Spin-Peierls-Übergang qualitativ übereinstimmt. Hiermit war eindeutig erwiesen, daß es sich bei dem beobachteten Phasenübergang tatsächlich um einen Spin-Peierls-Phasenübergang handelt.

2.3.3 Modellhamiltonoperator

Zur analytischen Behandlung des Hamiltonoperators (2.8) müssen noch einige Vereinfachungen durchgeführt werden. Die erste Vereinfachung betrifft die Phononendispersion. Zur Beschreibung von Spin-Peierls-Systemen nimmt man für gewöhnlich an, daß für den Übergang nur solche Phononenmoden relevant sind, die näherungsweise der Verzerrung in der D-Phase entsprechen. Diese wird durch einen Wellenvektor \vec{q}_d charakterisiert, und die Energie dieser Phononen wird durch $\omega := \omega(\vec{q}_d)$ approximiert

$$H_B = \omega \sum_{i,j} b_{i,j}^\dagger b_{i,j} \quad (2.11)$$

$$H_{SB} = \sum_{i,j} A_{i,j} (b_{i,j}^\dagger + b_{i,j}) \quad (2.12)$$

mit

$$A_{i,j} = g (\mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+1,j} - \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i-1,j}) . \quad (2.13)$$

Der Index i numeriert hier Plätze innerhalb einer in c -Richtung verlaufenden Kette, während j die verschiedenen Ketten numeriert. Durch die Vernachlässigung der Dispersion ist die Kopplung der lokalen Phononen $b_{i,j}$ auf der Kette j mit den Spins auf benachbarten Ketten verloren gegangen. Eine Einheitszelle von CuGeO_3 beinhaltet jedoch jeweils zwei Ketten (vgl. Abb. 2.2). Daher ist es plausibel anzunehmen, daß ein lokales Phonon $b_{i,j}$ sowohl an die Spins der Kette selbst als auch an die Spins der beiden benachbarten Ketten koppelt. Dies kann in H_{SB} durch einen zusätzlichen Term für die Kopplung der Spins der Kette j an die Phononen der Ketten $j \pm 1$ berücksichtigt werden [15]

$$A_{i,j} = g \left(\mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+1,j} - \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i-1,j} + f \sum_{j'=\pm 1} (\mathbf{S}_{i+1,j'} \mathbf{S}_{i,j'} - \mathbf{S}_{i,j'} \mathbf{S}_{i-1,j'}) \right) , \quad (2.14)$$

mit einer die elastische Zwischenkettenkopplung charakterisierenden Konstante f . Die weitere Vorgehensweise hängt von den Größenordnungen der für das Spin- bzw. Phononensystem charakteristischen Energieskalen ab. Wenn die für das Phononensystem charakteristische Energie $\omega(\vec{q}_d)$ weit niedriger liegt als die für das magnetische System relevanten Energien J, Δ , bietet sich eine mittlere Feldnäherung an, in der die Phononenoperatoren durch ihre statischen Erwartungswerte ersetzt werden. Die Dimerisierung $\delta_{i,j}$ wird definiert durch

$$\langle b_{i,j} \rangle := \frac{J}{2g} \delta_{i,j} . \quad (2.15)$$

Der Spin-Peierls-Hamiltonian $H_{SP} = H_B + H_S + H_{SB}$ lautet in dieser Näherung

$$H_{SP} = \sum_{i=1}^N J(1 + \delta_i) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha J \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} + \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N \delta_i^2 , \quad (2.16)$$

wobei im Hinblick auf die Anwendung auf CuGeO₃ dem reinen Spinanteil noch ein Frustrationsterm $\sim \alpha J$ angefügt wurde. Die elastische Konstante ergibt sich aus der relevanten Phononenfrequenz ω zu $K = \frac{\omega J^2}{2g^2}$. Gleichung 2.16 beschreibt eine antiferromagnetische eindimensionale frustrierte Heisenbergkette mit alternierender Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn. Der elastische Anteil $\sim \delta_i^2$ stellt bei fester Dimerisierung eine triviale Konstante dar. Die δ_i werden jedoch im allgemeinen selbstkonsistent bestimmt, wobei dieser Anteil eine wesentliche Rolle spielt (vgl. Abschnitt 4.1).

Als Bedingung für die Gültigkeit des Molekularfeldzugangs geben M. C. Cross und D. S. Fisher [16] 1979 an, daß die für den Spin-Peierls-Übergang relevanten Phononen eine im Vergleich zur magnetischen Austauschenergie niedrige Energie aufweisen („soft phonons“). Anders als bei den damals bekannten organischen Spin-Peierls-Substanzen ist diese Bedingung für CuGeO₃ nicht erfüllt. Die Energien der für den Spin-Peierls-Übergang relevanten Phononenmoden liegen zwischen 150 K und 1000 K, während die für das magnetische System charakteristischen Energien bei $J/k_B \simeq 115\text{-}150\text{K}$ bzw. $\Delta/k_B \simeq 23\text{K}$ liegen [17, 18]. Statt der oben skizzierten adiabatischen Behandlung der Phononen ist eine antiadiabatische Behandlung der Phononen realistischer [15]. Trotz dieser Diskrepanz konnten viele der Eigenschaften von CuGeO₃ mit Hilfe des Molekularfeld-Zuganges erklärt werden. Auch in der vorliegenden Arbeit wird abgesehen von einigen Erweiterungen ausschließlich der Hamiltonian 2.16 betrachtet. In Abschnitt 4.2 wird auf die Terme, die bei einer antiadiabatischen Behandlung auftreten, eingegangen, und es wird gezeigt, daß ein Hamiltonian resultiert, der weitgehende

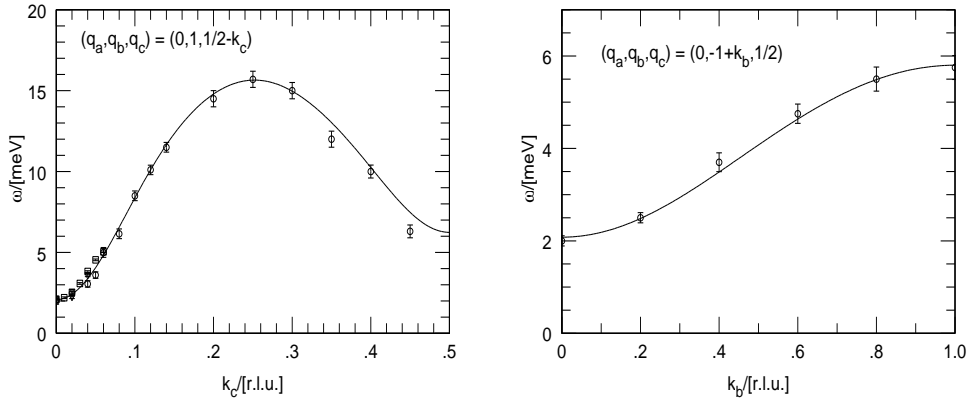


Abbildung 2.4: a: Dispersion von CuGeO_3 in c-Richtung. Die Meßpunkte sind aus Ref. [19], die durchgezogene Linie ist ein Fit aus Ref. [22]

Parallelen zu dem aus der adiabatischen Phononenbehandlung gewonnenen aufweist.

2.3.4 Magnetischer Austausch in CuGeO_3

Zur experimentellen Bestimmung der Austauschkonstanten in CuGeO_3 wurde von Regnault et al. [19] mittels inelastischer Neutronenstreuung die Dispersion in den verschiedenen Kristallrichtungen gemessen und mit bekannten analytischen Ausdrücken [20] verglichen. Abbildung 2.4 zeigt die gemessenen Dispersionskurven in c- und b-Richtung. Die Dispersion in a-Richtung kann in guter Näherung vernachlässigt werden [21]. Anhand dieser Daten ermittelten Regnault et al. für die Austauschkonstanten in den einzelnen Richtungen Werte von $J_c \simeq 10.3 \text{ meV}$, $J_b \simeq 0.1 J_c$ und $J_a \simeq -0.01 J_c$. Damit ist der Austausch in c-Richtung zwar dominierend, aber der relativ große Wert für J_b zeigt, daß eine realistische Modellierung von CuGeO_3 auch die Einbeziehung von Effekten der Zwischenkettenkopplung notwendig macht.

Die Austauschwechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn in CuGeO_3 wird im allgemeinen auf einen Superaustausch über die zwischen den Cu^{2+} -Ionen liegenden O(2) Sauerstoffatome (vgl. Abb. 2.2) zurückgeführt [9, 23, 24]. Für die Stärke der Austauschwechselwirkung ist hierbei der Cu-O(2)-Cu-Bindungswinkel entscheidend. So würde ein Winkel von 180° zu einer stark antiferromagnetischen Kopplung führen, während ein Winkel von 90° eine schwache ferromagnetische Kopplung zur Folge hätte (Goodenough-Kanamori-Regel [25]). Der tatsächliche

Cu-O-Cu-Bindungswinkel beträgt in CuGeO₃ etwa 98°, liegt also relativ nahe beim "ferromagnetischen Winkel" von 90°. Nach Braden et al. [9] reicht diese Abweichung aus, um einen realistischen [19] antiferromagnetischen Austausch von $J_c \simeq 12.4$ meV zu erhalten. Geertsma und Khomskii [24] erhalten dagegen unter alleiniger Berücksichtigung des Cu-O-Cu-Superaustauschs eine zu geringe bis negative Austauschkonstante. Die Autoren erklären dies damit, daß bei diesen Rechnungen das zu dem O(2)-Atom benachbarte Germaniumion nicht berücksichtigt wird und erhalten erst bei Berücksichtigung des Germaniumions einen Austausch von $J_c \simeq 11.2$ meV.

Die für den Spin-Peierls-Übergang relevante Phononenmode entspricht einer alternierenden Vergrößerung bzw. Verkleinerung des Abstands zwischen den Cu²⁺-Ionen und damit des Cu-O-Cu-Bindungswinkels. Eine Verkleinerung dieses Winkels bedeutet jedoch eine Verkleinerung der Austauschkonstante und umgekehrt, so daß im Falle einer Dimerisierung die stärkere Kopplung jeweils zwischen den weiter voneinander entfernt liegenden Cu²⁺-Ionen vorliegt.

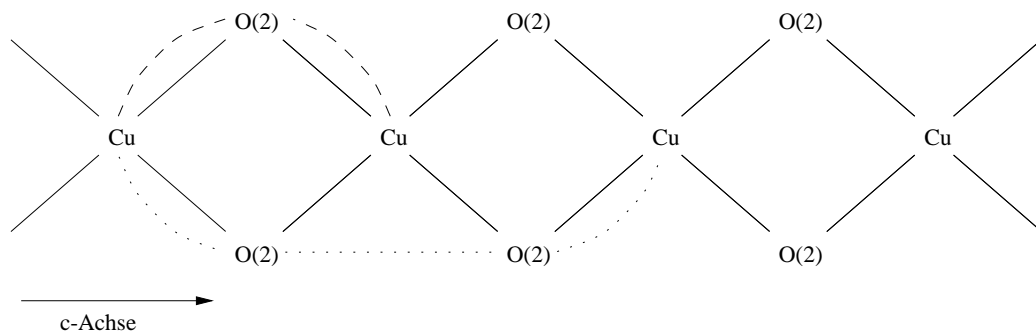


Abbildung 2.5: Austauschpfade für die Kopplungen in der c-Richtung von CuGeO₃. Die gestrichelte Linie deutet den Superaustauschpfad für die Austauschkonstante J_c an, und die gepunktete Linie zeigt den Pfad für die Frustration αJ_c .

Neben dem Superaustausch über ein O(2)-Atom ist auch der Superaustauschpfad, der ein Cu²⁺-Ion über zwei benachbarte O(2)-Atome mit seinem übernächsten Nachbarn längs der c-Achse verbindet (vgl. Abb. 2.5), zu berücksichtigen. Dieser führt zu einer Frustration $\alpha \cdot J_c$, die wir im Hamiltonian 2.16 schon eingeführt haben. Geertsma und Khomskii erhalten in ihrer ab initio-Rechnung für α einen Wert von ~ 0.23 . Fits der Suszeptibilität [14] ergeben dagegen einen Wert von $\alpha = 0.35$ und Fits der Dispersion [26] $\alpha \simeq 0.3$.

Die Zwischenkettenkopplung $J_b := \mu J_c$ verbindet jeweils zwei äquivalente

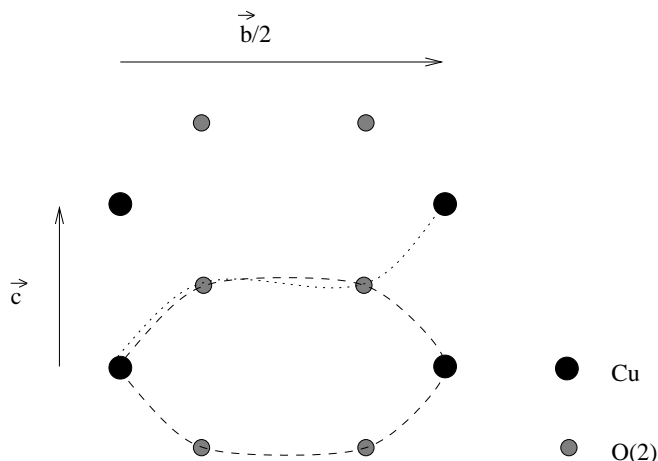


Abbildung 2.6: Austauschpfade für die Kopplungen in b -Richtung. Die gestrichelten Linien zeigen die beiden Pfade für die direkte Zwischenkettenkopplung $J_b = \mu J_c$ an, die gepunktete Linie den Pfad für die Zwischenkettenfrustration $\mu\beta J_c$. Es handelt sich um eine schematische Aufsicht aus der a -Richtung auf Abbildung 2.2

auf in b -Richtung benachbarten Ketten liegende Cu^{2+} -Ionen (vgl. Abb. 2.7). Sie kommt über die zwei äquivalenten Cu-O(2)-O(2)-Cu Austauschpfade (siehe Abb. 2.6) zustande, wobei die beiden O(2) diesmal O(2) -Atome sind, die auf verschiedenen in b -Richtung benachbarten Oktaedern liegen (vgl. Abb. 2.2). In b -Richtung ist zusätzlich eine "Zwischenkettenfrustration" denkbar. Dabei handelt es sich wie in Abb. 2.7 (gepunktete Linien) gezeigt um eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen Spins benachbarter Ketten, die in c -Richtung um einen Gitterplatz gegeneinander versetzt sind. Der Austauschpfad für diese Wechselwirkung ist in Abbildung 2.6 (gepunktete Linie) angedeutet. Für die beschriebene Kopplung kommt im Gegensatz zur direkten Zwischenkettenkopplung nur ein Austauschpfad in Betracht, so daß zu erwarten ist, daß diese betragsmäßig bei etwa $J_b/2$ liegt.

Uhrig schlägt ein Modell für CuGeO_3 [22] vor, bei dem alle bisher in diesem Abschnitt aufgeführten Kopplungen berücksichtigt werden. In Abbildung 2.7 ist diese Situation anhand eines Segmentes zweier benachbarter dimerisierter Ketten schematisch dargestellt ¹. In Abb. 2.7 wird berücksichtigt, daß das Dimerisierungsprofil von Kette zu Kette um einen Gitterplatz verschoben ist,

¹Die in Abbildung 2.7 verwendeten Notationen weichen von denen in Ref. [22] ab.

wie in Neutronenstreuexperimenten an der D-Phase von CuGeO₃ [9, 27] gefunden wurde. Anhand einer Störungsrechnung bis zur dritten Ordnung ausgehend

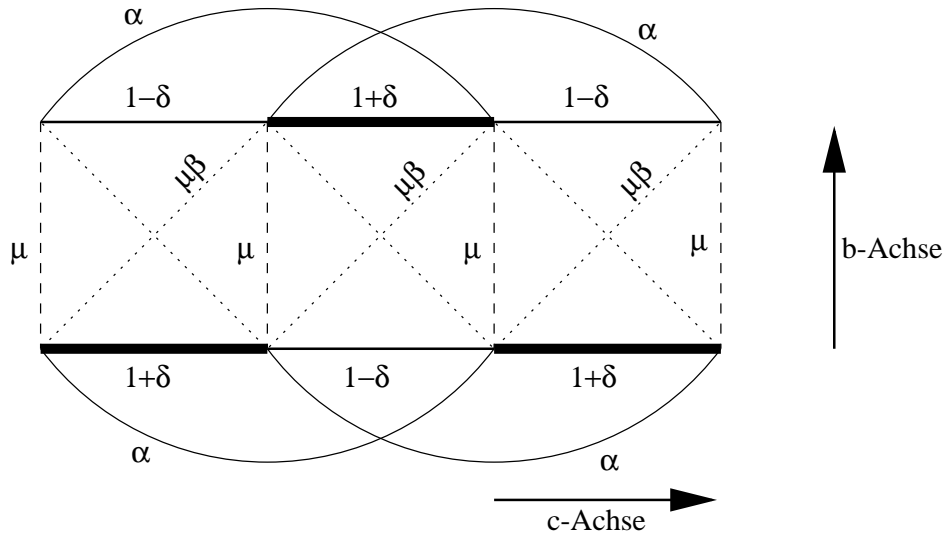


Abbildung 2.7: Zweidimensionales Spin-Modell für CuGeO₃ unter Einbeziehung der im Text beschriebenen Kopplungen. ($J_c = 1$) Es ist ein Segment aus zwei in *b*-Richtung benachbarten dimerisierten Ketten, die in *c*-Richtung verlaufen, gezeigt.

vom vollständig dimerisierten Fall ($\delta = 1$) berechnet Uhrig die Dispersionsrelationen in *c*- und *b*-Richtung in Abhängigkeit der in Abb. 2.7 eingetragenen Kopplungskonstanten. Die durchgezogenen Linien in Abb. 2.4 sind Fits der so erhaltenen Dispersion an die experimentellen Daten. Die anhand dieser Fits vorgeschlagenen Werte für die Austauschkonstanten und Dimerisierung liegen bei $J_c \simeq 9.8\text{meV}$, $\delta \simeq 0.124$, $\alpha = 0$, $\mu := J_b/J_c \simeq 0.33$, $\beta \simeq 0.3$.

Knetter und Uhrig [26, 28] schlagen aufgrund einer weiterführenden Analyse bis in 10. Ordnung drei verschiedene Werte für β ($\beta = 0.3, -0.3, 0$) vor und erhalten, abhängig vom gewählten β , Werte für die Frustration, die bei $\alpha \simeq 0.3$ liegen. Für die Zwischenkettenkopplung werden abhängig von β die Werte $\mu_{\beta=0.3} = 0.29$, $\mu_{\beta=0} = 0.14$, $\mu_{\beta=-0.3} = 0.09$ angegeben, und die Austauschkonstante J_c liegt in allen drei Fällen etwa bei $J_c \simeq 13\text{meV}$. Das in den genannten Referenzen benutzte Verfahren erlaubt es leider nicht, einen Wert für β zu fixieren. In Abschnitt 4.6 werden daher anhand dieser Werte durchgeführte DMRG-Rechnungen beschrieben. Durch Vergleich der erhaltenen Daten mit dem Experiment soll einer der drei Werte favorisiert werden.

2.3.5 Die verschiedenen Phasen von CuGeO_3

In Abschnitt 2.1 wurde bereits das typische Verhalten von Spin-Peierls-Systemen im Magnetfeld angedeutet. Das experimentelle Phasendiagramm von CuGeO_3 im

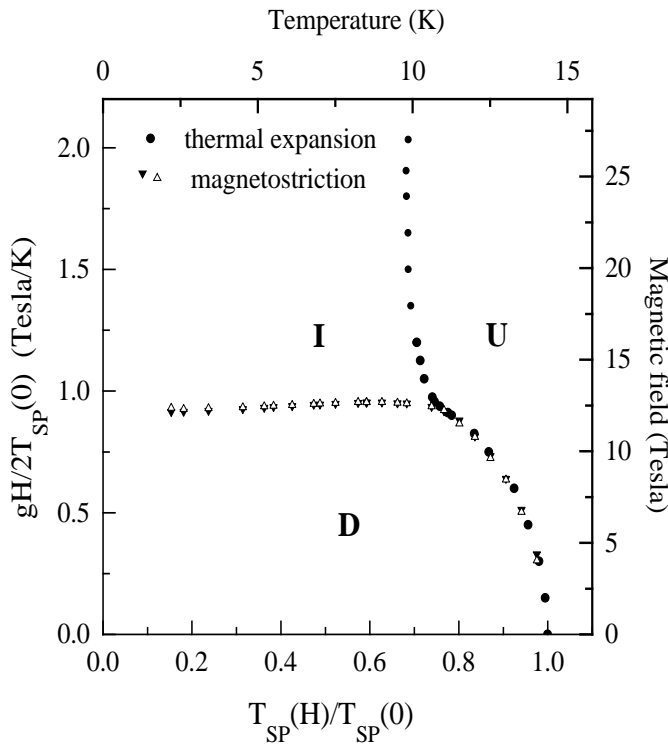


Abbildung 2.8: Phasendiagramm von CuGeO_3 im Magnetfeld [10]

Magnetfeld wird in Abb. 2.8 gezeigt. Es zeigt qualitativ das für Spin-Peierls-Systeme theoretisch vorhergesagte [16, 2] und an den vor CuGeO_3 bekannten, organischen Spin-Peierls-Substanzen beobachtete Verhalten. Der Parameterbereich ist in drei Gebiete unterteilt, die U-Phase, die D-Phase und die I-Phase. Die Grenzen der verschiedenen Phasen schneiden sich in einem Punkt, dem sogenannten Lifshitz-Punkt [29].

Bei hohen Temperaturen liegt CuGeO_3 in der U-Phase vor, in der das Gitter unverzerrt ist. Die Cu^{2+} -Ionen liegen äquidistant entlang der c-Achse, und das System kann durch den Hamiltonoperator 2.16 ohne Dimerisierung, also mit $\delta_i = 0, \forall i = 1, \dots, N$ beschrieben werden.

Unterhalb eines kritischen Feldes geht das System bei Absenken der Temperatur unter die magnetfeldabhängige kritische Temperatur $T_{\text{SP}}(H)$ in die D-

Phase über. Die Übergangstemperatur beträgt bei verschwindendem Feld gerade $T_{SP} \simeq 14\text{K}$. Der Übergang von der U-Phase in die D-Phase ist von zweiter Ordnung. Die in der D-Phase vorliegende alternierende Verzerrung der Kette führt dazu, daß die Kopplungsstärke $J(i)$ zwischen benachbarten Spins entsprechend alterniert. Es treten abwechselnd "starke Bonds" der Stärke $J(i) = J(1 + \delta)$ und schwache mit $J(i') = J(1 - \delta)$ auf. Im Hamiltonoperator 2.16 muß $\delta_i = (-1)^i \delta$ mit der festen Dimerisierung δ gesetzt werden. Wie in Abschnitt 2.3.4 bereits erläutert, treten die schwachen Bonds gerade zwischen den Cu^{2+} -Ionen auf, die *näher* aneinander rücken. Die magnetische Energie kann in dieser Phase besonders stark abgesenkt werden, indem die über starke Bonds miteinander verbundenen Spins Zustände mit hohem Singulettcharakter einnehmen. In Abbildung 2.9 ist diese Situation veranschaulicht. Für eine unfrustrierte Spinkette läßt sich

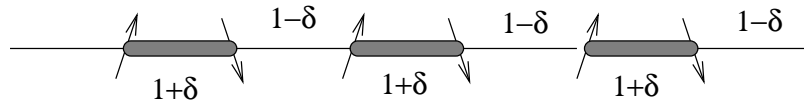


Abbildung 2.9: Dimerisierte Spinkette mit Singulett an den starken Bonds

zeigen, daß die Absenkung der magnetischen Energie, die so erreicht werden kann, proportional zu $\delta^{\frac{4}{3}}$ ist [16], während die Anhebung der elastischen Energie in der Beschreibung durch den Hamiltonoperator (2.16) proportional zu δ^2 ist, so daß bei hinreichend kleiner Dimerisierung die Absenkung der magnetischen Energie die Anhebung der elastischen Energie überwiegt. Dies ist der treibende Mechanismus für den Übergang von der U-Phase in die D-Phase. Da die Spins in der D-Phase Singulett bilden, verschwindet hier die lokale Magnetisierung $\langle S_i^z \rangle$. Erhöht man in der D-Phase das Magnetfeld, so bleibt diese stabil, solange man unterhalb eines temperaturabhängigen kritischen Wertes bleibt. Dies ist auf die in der D-Phase vorhandene Energielücke im magnetischen Anregungsspektrum zurückzuführen.

Bei weiterer Erhöhung des Magnetfeldes muß die D-Phase spätestens dann instabil werden, wenn die zu dem Feld gehörige Zeemanenergie $g\mu_B H_c$ ausreicht, um die Energielücke Δ zwischen dem Grundzustand ($S=0$) und dem ersten angeregten Zustand ($S=1$) zu überbrücken. In Wirklichkeit tritt die Instabilität schon bei einem Feld auf, dessen Zeemanenergie ca. 80% der Energielücke beträgt. Die Ursache für den niedrigeren Wert ist, daß das Verzerrungsprofil sich

neu einstellt, so daß der neue Zustand energetisch günstiger liegt als der erste angeregte Zustand einer fest dimerisierten Spinkette.

Bei diesem Phasenübergang von der D-Phase in die I-Phase werden einige Singulettts aufgebrochen. Die entstehenden Triplettts mit $S = 1$ zerfallen zu jeweils zwei sogenannten Spinonen. Dies sind Bereiche endlicher Magnetisierung, die jeweils einen Gesamtspin von $S = 1/2$ tragen und immer in Paaren auftreten, da der Gesamtspin des Systems ganzzahlig sein muß. Die Dimerisierung stellt sich hierbei so ein, daß die Gesamtenergie des Systems minimal ist. In den Bereichen endlicher Magnetisierung wird die magnetische Energie durch eine endliche Dimerisierung nicht mehr abgesenkt, so daß die Dimerisierung in der Umgebung eines Spinons bis auf Null absinkt. Abbildung 2.10 zeigt ein typisches Dimerisierungsmuster zusammen mit den zugehörigen lokalen Magnetisierungen. Im Verzerrungsmuster sind Bereiche gleichförmiger Dimerisierung durch Nullstellen, in deren Umgebung ein tanh-artiges Profil vorliegt, getrennt. Im Magnetisierungsprofil sieht man die Spinonen, die an den Nullstellen der Dimerisierung lokalisiert sind und jeweils den Spin $\sum_i \langle \mathbf{S}_i^z \rangle = \frac{1}{2}$ tragen. Eine solche Nullstelle der Dimerisierung zusammen mit dem an ihr lokalisierten Spinon soll im folgenden als Soliton bezeichnet werden. Die inkommensurable Phase von Spin-Peierls-Systemen ist Gegenstand einer Reihe experimenteller sowie theoretischer Arbeiten. Kontinuumstheorien [30, 31, 32] ergeben für das Dimerisierungsprofil δ_i und die lokale Magnetisierung m_i in der I-Phase Ausdrücke der folgenden Form:

$$\begin{aligned} \delta_i &= (-1)^i \delta \operatorname{sn} \left(\frac{r_i}{k\xi}, k \right), \\ m_i &= m_0^{\text{un}} \operatorname{dn} \left(\frac{r_i}{k\xi}, k \right) + (-1)^i m_0^{\text{alt}} \operatorname{cn} \left(\frac{r_i}{k\xi}, k \right), \end{aligned} \quad (2.17)$$

wobei sn , dn , cn die Jacobischen elliptischen Funktionen zum Modulus k bezeichnen [33]. Die Ausdehnung der Solitonen ist in dieser Beschreibung durch den Parameter ξ gegeben. Die lokale Magnetisierung setzt sich aus einem langsam veränderlichen Anteil $\sim \operatorname{dn}$, der im folgenden mit m^{un} („uniform“) bezeichnet werden soll, und einem alternierenden Anteil $(-1)^i \sim \operatorname{cn}$ zusammen, wobei offenbar nur der langsam veränderliche Anteil zur Gesamtmagnetisierung beiträgt.

Das erste Experiment zur Bestimmung einer Solitonenbreite wurde von Kiryukhin und Keimer durchgeführt [34]. Die genannten Autoren ermittelten mittels elastischer Röntgenstreuung den ersten und dritten harmonischen Beitrag

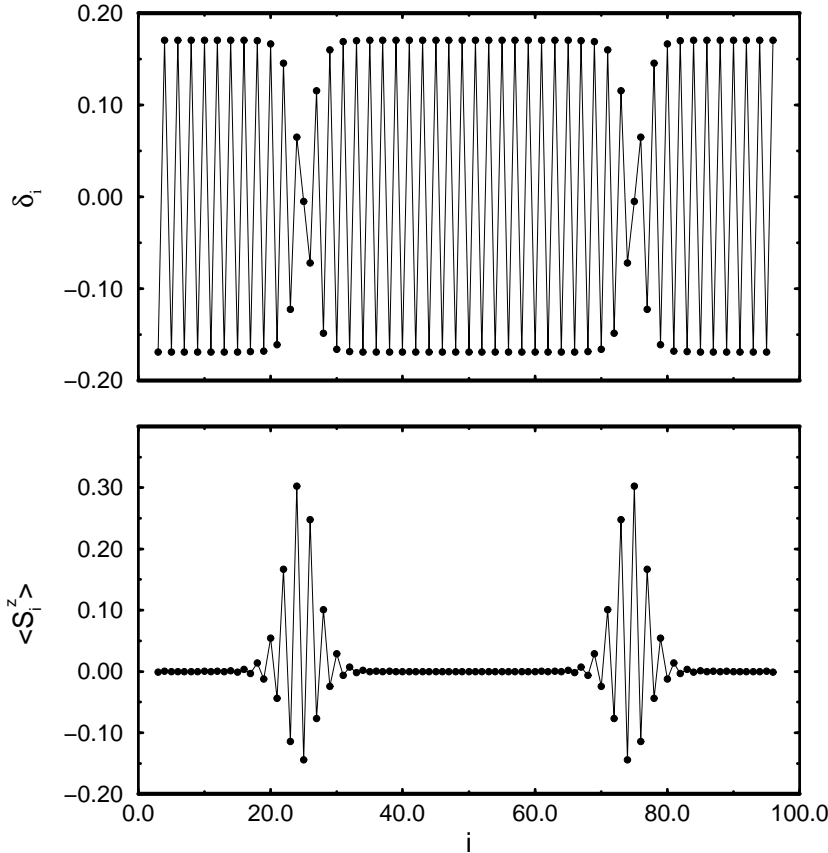


Abbildung 2.10: Typische Solitonenform in der I-Phase von CuGeO₃ aus einer DMRG-Rechnung (vgl. Abschnitt 4.1). Es sind das Dimerisierungsprofil (oberer Teil) und die lokalen Magnetisierungen (unterer Teil) jeweils gegen den Gitterplatz i aufgetragen.

zum Verzerrungsmuster und erhielten durch einen Fit an die exakt bekannte Fouriertransformierte der sn -Funktion einen Wert von $\xi \simeq 13.6a$. Allerdings basiert der Fit auf einer Reihe von Annahmen, die das Resultat unsicher erscheinen lassen. Desweiteren wurden in Kernspinresonanz-Experimenten [35, 36, 37] die Form und Amplitude der lokalen Magnetisierung in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes untersucht. In den zitierten Arbeiten konnte eine Verteilungsfunktion für die Werte der lokalen Magnetisierungen bestimmt werden. Diese Funktion kann auch mit Hilfe des zweiten Teils von Gleichung 2.17 in Abhängigkeit der dort vorkommenden Parameter berechnet werden, so daß man m_0^{un} , m_0^{alt} , ξ aus einem Fit der experimentellen Verteilung an die berechnete erhalten kann.

Überraschenderweise ergaben sich aus diesen Experimenten Solitonenbreiten von 6 bis 10 Gitterplätzen, die damit deutlich unter dem anhand der Verzerrungsmuster erhaltenen Wert liegen. Offenbar müssen daher in Glg. 2.17 unterschiedliche Breiten und Moduli, ξ_d, ξ_m, k_d, k_m , für den elastischen bzw. magnetischen Anteil der Solitonen eingeführt werden. Wir erhalten hiermit die Ausdrücke

$$m_i = \frac{W}{2} \left\{ \frac{1}{R} \text{dn} \left(\frac{r_i}{k_m \xi_m}, k_m \right) + (-1)^i \text{cn} \left(\frac{r_i}{k_m \xi_m}, k_m \right) \right\} \quad (2.18)$$

$$\delta_i = (-1)^i \delta \text{sn} \left(\frac{r_i}{k_d} \xi_d, k_d \right) . \quad (2.19)$$

Die Parameter $\xi_{d,m}$ und $k_{d,m}$ hängen, da die Periode der Funktionen durch Kettenlänge und Magnetisierung vorgegeben ist, direkt zusammen

$$4m k_{m/d} K(k_{m/d}) \xi_{m/d} = 1 , \quad (2.20)$$

wobei $K(k)$ das vollständige elliptische Integral 1. Art bezeichnet. Der alternierende Anteil der lokalen Magnetisierung 2.18 ergibt keinen Beitrag zur Gesamtmagnetisierung $m = \sum_i m_i$, so daß sich zusammen mit der Tatsache, daß der Mittelwert über eine Periode der dn -Funktion in Glg. 2.18 $\pi/(2K(k))$ beträgt [33], zusätzlich die folgende Relation ergibt

$$m = \frac{\pi W}{4RK(k_m)} . \quad (2.21)$$

Die Form der Solitonen, ihre Breiten und Amplituden sind Gegenstand der vorliegenden Arbeit.

Kapitel 3

Dichtematrix-Renormierung

Mit Hilfe des Dichtematrix-Renormierungsgruppen (DMRG)-Algorithmus von White [38, 39] können der Grundzustand, niedrige angeregte Zustände und Erwartungswerte von Operatoren bezüglich dieser Zustände mit großer Genauigkeit berechnet werden. Der erste numerische Renormierungsgruppen-Algorithmus geht auf Wilson [40] zurück, der diesen für das Kondoprobem entwickelte. Um das Grundkonzept der Renormierungsalgorithmen zu erläutern und die Notation festzulegen, soll im ersten Abschnitt dieses Kapitels ein einfaches Beispiel anhand einer Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergkette diskutiert werden. Im darauffolgenden Abschnitt wird die Erweiterung des Renormierungskonzepts zum Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Algorithmus erklärt. Der letzte Abschnitt geht kurz auf die Implementierung des DMRG-Algorithmus in dieser Arbeit ein.

3.1 Renormierungsidee

Allen numerischen Renormierungsgruppen-Algorithmen (RG-Algorithmen) ist gemein, daß man, beginnend mit einem kleinen (d.h. exakt diagonalisierbaren) Teilsystem (B), in jedem Schritt die Systemgröße vergrößert, indem man ein weiteres System (\tilde{B}) anfügt. Der Hilbertraum des so erhaltenen vergrößerten Systems wird in jedem solchen Schritt auf einen kleineren relevanten Unterraum reduziert. Die Art und Weise, auf die reduziert wird, unterscheidet die verschiedenen Renormierungsalgorithmen. Zum Beispiel wird bei den Wilsonschen RG-Algorithmien einfach der von den m niedrigsten Energieeigenzuständen des größeren Systems aufgespannte Unterraum gewählt.

In Abb. 3.1 ist ein solches Verfahren schematisch illustriert. Beginnend mit ei-

nem Block B (im ersten Schritt kann B z.B. ein einzelner Spin sein) wird in jedem Schritt ein neuer Block $B\tilde{B}$ gebildet, indem ein Block \tilde{B} hinzugefügt wird. \tilde{B} ist hierbei typischerweise entweder das (reflektierte) System selbst oder ein einzelner zusätzlicher Gitterplatz. Der Hamiltonoperator $H_{B\tilde{B}}$ des so erweiterten Blocks kann nun aus den Hamiltonoperatoren H_B und $H_{\tilde{B}}$ der beiden Teilsysteme und entsprechenden Kopplungstermen zusammengesetzt werden. Für eine Heisenbergkette mit Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn lautet die Vorschrift

$$H_{B\tilde{B}} = H_B \otimes 1_{\tilde{B}} + 1_B \otimes H_{\tilde{B}} + (S_B^r \otimes 1_{\tilde{B}}) \cdot (1_B \otimes S_{\tilde{B}}^l) . \quad (3.1)$$

Hierbei steht S_B^r für den Spinoperator des am rechten Rand von B liegenden Gitterplatzes und $S_{\tilde{B}}^l$ für den am linken Rand von \tilde{B} liegenden Spin. Im Falle einer Heisenbergkette mit Frustration müssen zwei weitere Kopplungsterme hinzugefügt werden, um die Wechselwirkung zwischen dem vorletzten (bzw. letzten) Gitterplatz des linken Blocks und dem ersten (bzw. zweiten Gitterplatz) des rechten Blocks zu berücksichtigen. Wenn H_B und $H_{\tilde{B}}$ in einem m - bzw. \tilde{m} -dimensionalen Hilbertraum wirken, so wirkt $H_{B\tilde{B}}$ in einem $m \cdot \tilde{m}$ -dimensionalen. Um das so entstandene System durch einen m -dimensionalen Hilbertraum zu beschreiben, bestimmt man beim Wilsonschen Renormierungsalgorithmus die m niedrigsten Eigenzustände $\{\mathbf{u}^\alpha\}_{\alpha=1,\dots,m}$ von $H_{B\tilde{B}}$ und bildet die Transformationsmatrix U , deren Zeilen die Vektoren \mathbf{u}^α sind. Mit Hilfe dieser Transformation wird nun die zu $H_{B\tilde{B}}$ gehörige $(m \cdot \tilde{m} \times m \cdot \tilde{m})$ -Matrix auf eine $(m \times m)$ -Matrix für $H_{B'}$ projiziert

$$H_{B'} = U H_{B\tilde{B}} U^\dagger . \quad (3.2)$$

Ebenso erhält man die für den nächsten Schritt benötigten Spinoperatoren für den rechten Rand von B'

$$S_{B'}^r = U S_{B\tilde{B}}^r U^\dagger . \quad (3.3)$$

Auf diese Weise entsteht durch Abschneiden der höheren Anregungen aus dem System $B\tilde{B}$ das System B' , mit dem im nächsten Schritt genauso verfahren wird wie mit dem System B . Je nach Wahl von \tilde{B} kann das System von Schritt zu Schritt bis auf die gewünschte Systemgröße erweitert werden, ohne daß die Dimension des Hilbertraums m übersteigt. Das Problem bei diesem Ansatz ist, daß man das System $B\tilde{B}$ als isoliert annimmt und so nicht berücksichtigt, daß es als in das Gesamtsystem eingebettet angesehen werden muß. Wenn $B\tilde{B}$ an das Gesamtsystem koppelt, sind die Eigenzustände des isolierten Systems $B\tilde{B}$ insbesondere am Rand im allgemeinen nicht geeignet, den Zustand des in das Gesamtsystem eingebetteten $B\tilde{B}$ zu beschreiben.

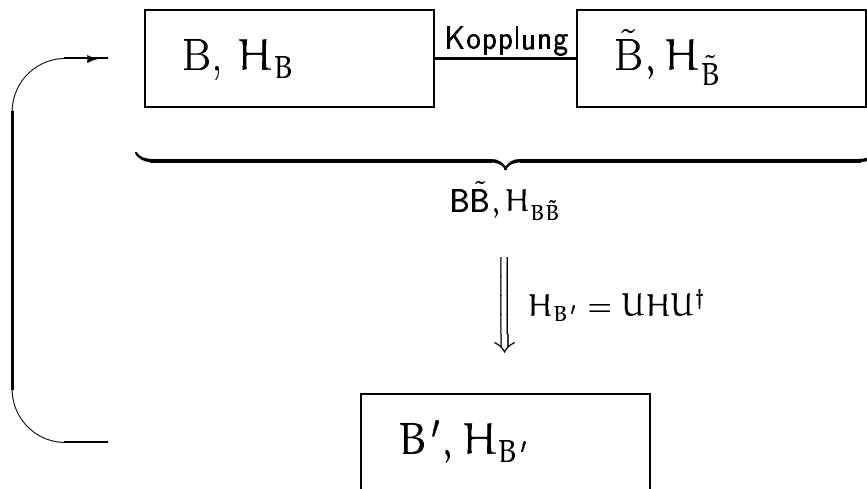


Abbildung 3.1: Ein einfacher Renormierungsalgorithmus

3.2 Renormierung mit Hilfe der Dichtematrix

3.2.1 Wahl einer optimalen Basis

Der grundlegende Unterschied des DMRG-Algorithmus zum oben diskutierten einfachen numerischen Renormierungsalgorithmus besteht in der Auswahl der zur Beschreibung des Systems $B\tilde{B}$ benutzten Zustände. Statt $H_{B,\tilde{B}}$ zu diagonalisieren und die m niedrigsten Eigenzustände zu verwenden, bettet man $B\tilde{B}$ zunächst in ein größeres System, den sogenannten Superblock, ein und ermittelt den interessierenden Eigenzustand des Superblocks, den sogenannten Zielzustand (für unsere Zwecke immer der Grundzustand). Gesucht ist nun ein Satz von m Zuständen von $B\tilde{B}$, mit deren Hilfe der Zielzustand optimal repräsentiert werden kann. Dieser Abschnitt soll aufzeigen, wie anhand der noch zu definierenden reduzierten Dichtematrix des Teilsystems $B\tilde{B}$ bezüglich des Gesamtsystems ein solcher Satz gefunden werden kann.

Hierzu betrachte man ein System L, das an ein zweites System R (den Rest des Gesamtsystems) gekoppelt ist [39] und mit diesem zusammen den Superblock bildet. Ziel ist es nun, den Zielzustand $|\psi\rangle$ des Superblocks durch einen eingeschränkten Satz von Basiszuständen von L möglichst gut zu approximieren. Hierzu drücke man $|\psi\rangle$ als Entwicklung im Tensorprodukt der Orthonormalbasen

$\{|i\rangle_L\}_{i=1\dots l}$ bzw. $\{|j\rangle_R\}_{j=1\dots r}$ von L bzw. R aus

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle . \quad (3.4)$$

Soll das System L durch einen m -dimensionalen Hilbertraum, aufgespannt durch die Vektoren $\{|\tilde{u}^\alpha\rangle\}_{\alpha=1\dots m}$ mit $m < l$, beschrieben werden, so bedeutet dies, daß der Zielzustand durch einen Satz von Produktzuständen der Form $\{|\tilde{u}^\alpha\rangle \otimes |j\rangle\}_{\alpha=1\dots m, j=1\dots r}$ approximiert werden muß. Der Näherungszustand lautet dann

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha,j} |\tilde{u}^\alpha\rangle |j\rangle , \quad (3.5)$$

und ein Maß für den Fehler S der Approximation ist

$$S = \|(|\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle)\|^2 . \quad (3.6)$$

Setzt man $|\tilde{v}^\alpha\rangle := N_\alpha^{-1} \sum_j a_{\alpha,j} |j\rangle$ mit den Normierungsfaktoren $N_\alpha^2 = \sum_j |a_{\alpha,j}|^2$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}\rangle &= \sum_{\alpha=1}^m N_\alpha |\tilde{u}^\alpha\rangle |\tilde{v}^\alpha\rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^{l,r} \tilde{\psi}_{i,j} |i\rangle |j\rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

mit

$$\tilde{\psi}_{i,j} := \sum_{\alpha=1}^m N_\alpha \tilde{u}_i^\alpha \tilde{v}_j^\alpha . \quad (3.8)$$

Die Zahlen $\tilde{u}_i^\alpha, \tilde{v}_j^\alpha$ sind hier gerade die Komponenten der orthogonalen Zustandsvektoren $|\tilde{u}^\alpha\rangle$, bzw. $|\tilde{v}^\alpha\rangle$ bezüglich der Basen $|i\rangle, |j\rangle$, d.h. $\tilde{u}_i^\alpha = \langle i|\tilde{u}^\alpha\rangle$ und $\tilde{v}_j^\alpha = \langle j|\tilde{v}^\alpha\rangle$. Der Fehler S läßt sich nun schreiben als

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i,j=1}^{l,r} |\psi_{i,j} - \sum_{\alpha=1}^m N_\alpha \tilde{u}_i^\alpha \tilde{v}_j^\alpha|^2 \\ &= \sum_{i,j=1}^{l,r} |\psi_{i,j} - \tilde{\psi}_{i,j}|^2 . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Das Problem der Approximation eines Zielzustands wurde hiermit in das Problem, die $l \times r$ -Matrix ψ durch eine $l \times r$ -Matrix $\tilde{\psi}$ der durch Gleichung 3.8 vorgegebenen

Form zu approximieren, überführt. Zur Lösung dieses Problems der linearen Algebra drücke man S als Spur aus [41]

$$S = \text{Sp}\{(\psi - \tilde{\psi})^\dagger(\psi - \tilde{\psi})\}. \quad (3.10)$$

Dann zerlege man die $l \times r$ -Matrix $(\psi)_{i,j}$ mit Hilfe des im Anhang A bewiesenen SVD-Theorems in folgender Weise

$$\psi = UDV^\dagger, \quad (3.11)$$

wobei $U \in \mathbb{R}^{l \times l}$, $V \in \mathbb{R}^{r \times r}$ orthogonale Matrizen sind und $D \in \mathbb{R}^{l \times r}$ diagonal ist (d.h. $d_{i,j} = 0$ falls $i \neq j$). Der Einfachheit halber seien die nichtverschwindenden Elemente $d_{i,i}$ von D der Größe ihrer Beträge nach geordnet, was sich immer durch simultane Zeilen- und Spaltenvertauschungen in U und V^\dagger erreichen läßt. Dieselbe Transformation wende man nun auch auf die Matrix $(\tilde{\psi})_{i,j}$ an

$$U^\dagger \tilde{\psi} V =: \tilde{D} \iff \tilde{\psi} = U \tilde{D} V^\dagger, \quad (3.12)$$

was in Gleichung 3.10 eingesetzt

$$\begin{aligned} S &= \text{Sp}\{(\psi - \tilde{\psi})^\dagger(\psi - \tilde{\psi})\} \\ &= \text{Sp}V(D - \tilde{D})^\dagger U^\dagger U(D - \tilde{D})V^\dagger \\ &= \text{Sp}(D - \tilde{D})^\dagger(D - \tilde{D}) \\ &= \sum_{i,j} |d_{i,j} - \tilde{d}_{i,j}|^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

ergibt.

Aus dem letzten Ausdruck für S liest man ab, daß zur Minimierung von S die Matrix \tilde{D} diagonal gewählt werden muß, da D schon diagonal ist. Dies bedeutet aber, daß (bei optimaler Wahl von $\tilde{\psi}$) U , V , und \tilde{D} die SVD-Zerlegung von $\tilde{\psi}$ ergeben. Aus der Definition der Matrix $\tilde{\psi}$ liest man ab, daß der Rang von $\tilde{\psi}$ m beträgt (der Wertebereich wird durch die m linear unabhängigen Vektoren \tilde{u}^α aufgespannt). Anhand der Bemerkung zum SVD-Theorem in Anhang A kann nun gefolgert werden, daß \tilde{D} nur m nichtverschwindende Elemente haben kann, und zur Minimierung von S müssen diese nach Glg. 3.13 offenbar gerade den m größten Elementen, d^1, \dots, d^m von D entsprechen. Gleichung 3.12 für den optimalen Näherungszustand wird zu

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{i,j} &= (U \tilde{D} V^\dagger)_{i,j} \\ &= \sum_{\alpha=1}^m u_i^\alpha d_\alpha v_j^\alpha. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Die optimalen Werte für N^α , \tilde{u}_i^α und \tilde{v}_i^α in 3.8 können also mit Hilfe der SVD-Zerlegung von ψ bestimmt werden. Die N^α sind gerade die m größten Elemente von D und die \tilde{u}^α bzw. \tilde{v}^α die zugehörigen Spalten von U bzw. V . Theoretisch wäre mit dieser Erkenntnis ein Renormierungsverfahren denkbar, bei dem man in jedem Schritt die optimale Basis durch SVD-Zerlegung der Matrix $(\psi)_{i,j}$ gewinnt. Es stellt sich jedoch heraus, daß man diese Basis mit Hilfe der sogenannten reduzierten Dichtematrix des Teilsystems L einfacher, nämlich durch Diagonalisierung, gewinnen kann:

Die reduzierte Dichtematrix von L angekoppelt an R , unter der Annahme, daß das Gesamtsystem sich im reinen (Ziel-) Zustand $|\psi\rangle$ befindet, lautet [42]

$$\rho_{i,i'} = \sum_j \psi_{i,j} \psi_{i',j}^* . \quad (3.15)$$

Hierbei handelt es sich tatsächlich um eine Dichtematrix, d.h. ρ ist hermitesch, positiv, und es gilt $\text{Sp } \rho = 1$. Die Hermitizität liest man direkt aus Gleichung 3.15 ab. Für die Spur gilt

$$\begin{aligned} \text{Sp } \rho &= \sum_i \rho_{i,i} = \sum_{i,j} |\psi_{i,j}|^2 \\ &= \|\psi\|^2 = 1. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Drückt man ρ mit den Matrizen U , D und V aus der SVD-Zerlegung von ψ aus, so ergibt sich

$$\rho = U D^2 U^\dagger . \quad (3.17)$$

Man erkennt, daß die Eigenwerte $d_{i,i}^2$ von ρ positiv sind. Außerdem geht aus (3.17) hervor, daß U gerade die Dichtematrix ρ diagonalisiert. Um die Zustände $|u^\alpha\rangle$ zu erhalten, braucht daher nicht die SVD-Zerlegung von ψ gefunden zu werden. Es reicht aus, die nach Gleichung 3.15 definierte Dichtematrix zu bilden und diese zu diagonalisieren. Die m Eigenvektoren, die zu den m größten Eigenwerten von ρ gehören, ergeben dann die gesuchte optimale Basis.

Desweiteren läßt sich an dieser Stelle der Abschneidefehler S angeben. Aus Glg. 3.13 und der Wahl von \tilde{D} ergibt sich:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i=m+1}^l d_{i,i}^2 = \text{Sp } \rho - \sum_{i=1}^m d_{i,i}^2 \\ &= 1 - \sum_{i=1}^m d_{i,i}^2 . \end{aligned} \quad (3.18)$$

In der Praxis muß man jedoch berücksichtigen, daß das System R immer nur eine Näherung des Gesamtsystems sein kann, was eine zusätzliche Fehlerquelle bedeutet. Insofern ist (3.18) zwar ein guter Anhaltspunkt für den Fehler, strenggenommen jedoch nur eine untere Schranke.

Ausgehend von den in diesem Abschnitt dargestellten Tatsachen schlug White [38, 39] zwei Algorithmen vor, den „Infinite-Size“- und den „Finite-Size“-Algorithmus, bei denen die Basiszustände jeweils iterativ mit Hilfe der Dichtematrix (3.15) erzeugt werden.

3.2.2 Der Infinite-Size-Algorithmus

Beim Infinite-Size-Algorithmus wird der Block B in jedem Schritt mit Hilfe von Glg. 3.1 um einen Gitterplatz zum System $B' = B \bullet$ erweitert. B' wird nun mit dem reflektierten System $\bullet B^T$ zum Superblock $B \bullet \bullet B^T$ zusammengesetzt (ebenfalls mit Glg. 3.1). Für den Hamiltonoperator des Superblocks wird der Zielzustand (hier der Grundzustand) mit einer exakten Diagonalisierungsmethode berechnet. Hat man die gewünschte Systemgröße erreicht, so können an dieser Stelle die interessierenden Erwartungswerte über den Zielzustand berechnet werden. Will man einen weiteren Schritt ausführen, so muß aus dem Zielzustand die Dichtematrix nach Glg. 3.15 berechnet werden, wobei (i, i') hier die Zustände von $B \bullet$ und (j, j') , die Zustände von $\bullet B^T$ durchlaufen. Mit den m Eigenvektoren von ρ , die zu den höchsten Eigenwerten gehören, wird nun die Matrix T gebildet, deren m Zeilen gerade diese Vektoren sind. Analog zu Glg. 3.2 wird nun die zu $H_{B \bullet}$ gehörige Matrix auf eine $m \times m$ -Matrix für $H_{B'}$ transformiert

$$H_{B'} = T H_{B \bullet} T^\dagger . \quad (3.19)$$

Mit dem so erhaltenen neuen Block B' wird nun ebenso verfahren wie mit B . Zu Beginn des Algorithmus ist B typischerweise ein einzelner Gitterplatz, so daß der erste Superblock aus vier einzelnen Gitterplätzen zusammengesetzt wird. In Abbildung 3.2 ist dieses Verfahren veranschaulicht. Neben der eben beschriebenen sind auch andere Arten der Zusammensetzung des Superblocks denkbar. Insbesondere bei periodischen Randbedingungen führt die Tatsache, daß die zwei großen Blöcke B und B^T direkt verbunden sind, zu einer wesentlich dichteren Besetzung der Hamiltonmatrix des Superblocks. Daher ist es hier sinnvoll, statt der Konfiguration $B \bullet \bullet B$ die Konfiguration $B \bullet B \bullet$ für die Erzeugung des Superblocks zu verwenden [39]. Im Falle einer Heisenbergkette mit alternierender

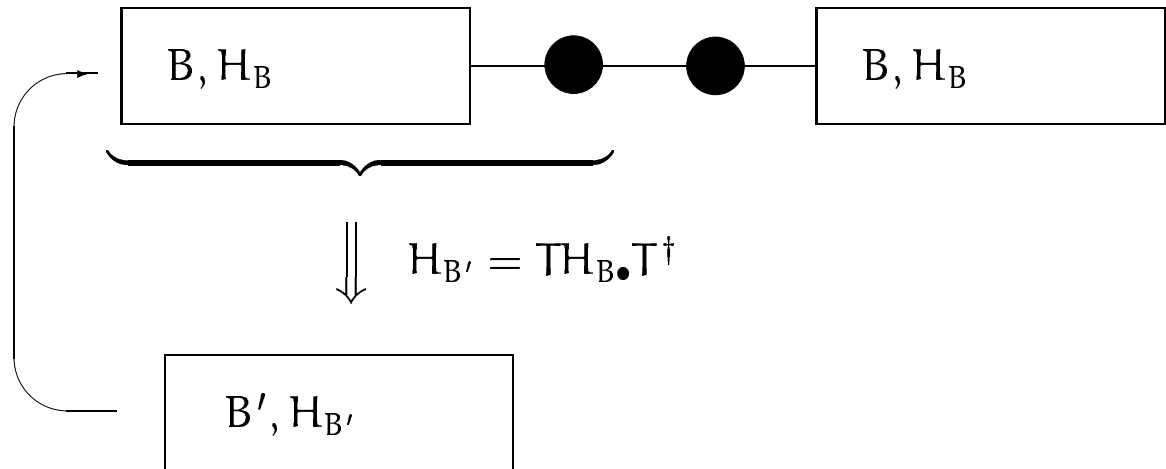


Abbildung 3.2: Der Infinite-Size-Algorithmus

Wechselwirkung ist die letzte Art der Zusammensetzung jedoch nicht verträglich mit dem Abwechseln der Austauschkonstanten und daher ungeeignet.

3.2.3 Der Finite-Size-Algorithmus

In jedem Schritt des Infinite-Size-Algorithmus wurde für die rechte Hälfte des Superblocks nicht wie in den Betrachtungen aus Abschnitt 3.2.1 der Rest des Gesamtsystems verwendet, sondern nur eine Näherung hierfür. Die mit Hilfe der Dichtematrix des so entstandenen Superblocks erzeugten Zustände zur Beschreibung der linken Hälfte des Systems sind daher nicht wirklich optimal im Sinne der Ausführungen aus Abschnitt 3.2.1. Aus diesem Grund kann nach Erreichen der gewünschten Systemgröße L mit dem Infinite-Size-Algorithmus die Genauigkeit durch weitere Renormierungsschritte, die die Systemgröße diesmal jedoch konstant lassen, erhöht werden. Hierzu werden während des Infinite-Size-Verfahrens alle erhaltenen Blöcke gespeichert, so daß im weiteren Blöcke der Längen $l = 1, \dots, L/2 - 1$, die hier mit $B_1, \dots, B_{L/2-1}$ bezeichnet werden sollen, zur Verfügung stehen.

Nach Erreichen der gewünschten Systemgröße L im Infinite-Size-Verfahren beginnt die zweite Phase des Finite-Size-Schritts. Beginnend mit der sich aus dem letzten Infinite-Size-Schritt ergebenden Konfiguration $[B_{L/2-1} \bullet \bullet B_{L/2-1}^\dagger]$ (vgl. Abb. 3.3) wird nun der linke Block in weiteren Schritten jeweils um einen Gitterplatz erweitert, so daß dieser im k -ten Finite-Size-Schritt die Länge $L/2 -$

1 + k hat.

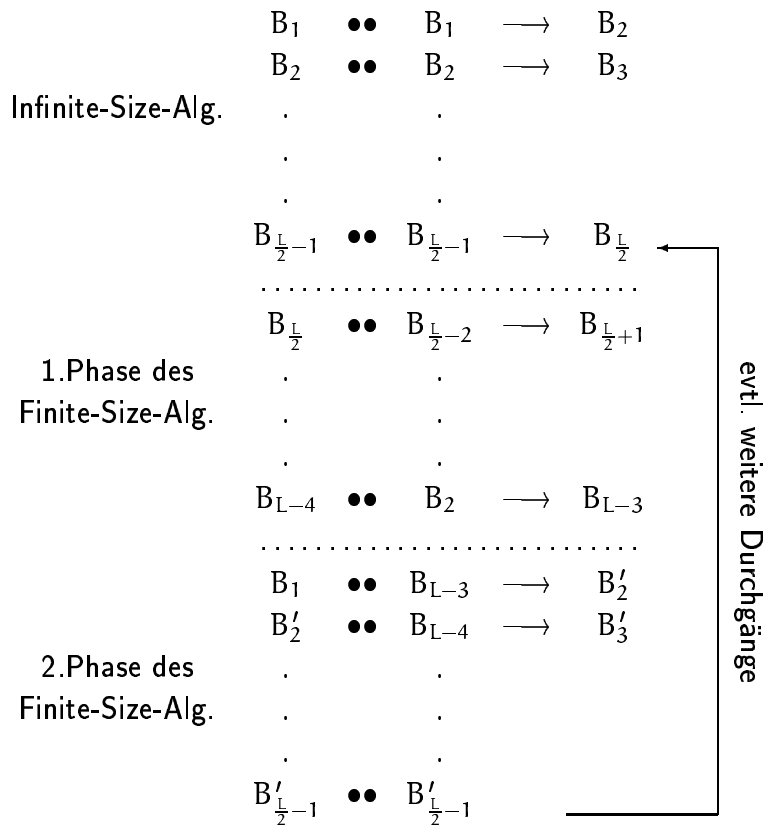


Abbildung 3.3: Die beim Finite-Size-Algorithmus auftretenden Superblöcke. Ein Pfeil „ \longrightarrow “ deutet jeweils den Reduktionsschritt an, bei dem aus dem System $B_l \bullet$ das m -dimensionale System B_{l+1} entsteht.

Die Erweiterung geschieht hierbei ebenso wie im Infinite-Size-Algorithmus mit Hilfe der Dichtematrix, die aus dem Zielzustand des zuvor gebildeten Superblocks gewonnen wurde. Zur Bildung des Superblocks wird jedoch nicht wie beim Infinite-Size-Algorithmus der Block selbst benutzt, sondern der im vorangehenden Infinite-Size-Algorithmus erzeugte und gespeicherte Block, $B_{L/2-k-1}$. So wird gewährleistet, daß der entstehende Superblock immer genau die Länge L hat, denn im k -ten Schritt liegt gerade die Superblockkonfiguration $[B_{L/2+k-1} \bullet \bullet B_{L/2-k-1}]$ vor. Hat man mit diesem Vorgehen die Konfiguration $[B_{L-4} \bullet \bullet B_2]$ erreicht und hieraus den Block B_{L-3} erhalten, so ist diese Phase des Finite-Size-Schritts beendet.

Die nächste Phase des Finite-Size-Schrittes beginnt damit, daß der Superblock $[B_1 \bullet \bullet B_{L-3}^r]$ gebildet wird, um hieraus den Block B'_2 zu erhalten. In weiteren Schritten wird wie zuvor der linke Teil B'_l des Superblocks um je einen Gitterplatz erweitert und durch einen der Blöcke $B_{L-4}, \dots, B_{L/2-1}$ zu einem Superblock der Länge L ergänzt, um nacheinander neue Blöcke $B'_3, \dots, B'_{L/2-1}$ zu erhalten. Bei der symmetrischen Konfiguration $[B'_{L/2-1} \bullet \bullet B'_{L/2-1}]$ angelangt ist ein „Finite-Size-Durchgang“ durch das System beendet. Hier können der zugehörige Zielzustand und alle interessierenden Erwartungswerte (vgl. Abschnitt 3.2.4) berechnet werden. Im allgemeinen wird durch einen einzigen solchen Durchgang die Genauigkeit im Vergleich zum reinen Infinite-Size-Algorithmus erheblich verbessert. Ausgehend von der zuletzt erhaltenen symmetrischen Konfiguration $[B'_{L/2-1} \bullet \bullet B'_{L/2-1}]$ können jedoch zusätzlich beliebig viele weitere solche Durchgänge durchgeführt werden.

3.2.4 Erwartungswerte

Das „Messen“ einer physikalischen Größe entspricht in einem DMRG-Verfahren der Berechnung des Erwartungswertes des entsprechenden Operators A . Hierzu wird der Zielzustand $|\psi\rangle$ des im letzten Schritt des Verfahrens erhaltenen Superblocks verwendet. Um explizite Ausdrücke zur Berechnung von Erwartungswerten zu erhalten, nehme man an, daß der betrachtete Superblock sich aus vier Teilblöcken zusammensetzt, wie es in den beiden in Abschnitt 3.2.2 bzw. 3.2.3 dargestellten Verfahren der Fall war (Block 2 und Block 3 waren hier jeweils einzelne Gitterplätze). Numeriert man die Zustände der vier Teilsysteme mit den Indizes i_1, i_2, i_3, i_4 durch, so lautet die allgemeine Vorschrift zur Berechnung des Erwartungswertes eines Einteilchenoperators, der auf einen Gitterplatz in Block 1 wirkt

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4, i'_1} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}^\dagger A_{i_1, i'_1} \psi_{i'_1 i_2 i_3 i_4}. \quad (3.20)$$

Nach dieser Vorschrift kann z.B. die lokale Magnetisierung $m_i = \langle S_i^z \rangle$ berechnet werden. Zur Berechnung von Erwartungswerten von Produkten von zwei Einteilchenoperatoren unterscheidet man, ob die beiden Operatoren auf verschiedenen Blöcken wirken oder nicht. Für den Fall, daß beide auf verschiedenen Blöcken wirken (z.B. A auf Block 1 und B auf Block 2), ergibt sich wegen $\langle i_1 i_2 i_3 i_4 | A B | i'_1 i'_2 i'_3 i'_4 \rangle = \langle i_1 | A | i'_1 \rangle \langle i_2 | B | i'_2 \rangle \delta_{i_3, i'_3} \delta_{i_4, i'_4}$:

$$\langle \psi | A B | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4, i'_1, i'_2} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}^\dagger A_{i_1, i'_1} B_{i_2, i'_2} \psi_{i'_1 i'_2 i_3 i_4}. \quad (3.21)$$

Bei Operatoren A, B , die auf demselben Block wirken (z.B. Block 1), ist die naheliegende Vorschrift

$$\langle \psi | AB | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4, i_1', i_1''} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}^\dagger A_{i_1, i_1'} B_{i_1', i_1''} \psi_{i_1'', i_2 i_3 i_4} \quad (3.22)$$

inkorrekt. Wegen der Reduktion der Basis in jedem DMRG-Schritt durchläuft i_1' nämlich keinen vollständigen Satz von Basisvektoren, so daß $\sum_{i_1'} |i_1'\rangle \langle i_1'| \neq 1$. Vielmehr muß hier in jedem Schritt die Matrix $A \cdot B$ berechnet und gespeichert werden. Deren Erwartungswert kann dann ebenso wie in Glg. 3.20 berechnet werden:

$$\langle \psi | AB | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4, i_1'} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}^\dagger (AB)_{i_1, i_1'} \psi_{i_1' i_2 i_3 i_4} \cdot \quad (3.23)$$

3.3 Implementierung

Der in dieser Arbeit verwendete DMRG-Algorithmus wurde in der objektorientierten Programmiersprache C++ implementiert. Dabei wurde auf von Schönfeld erstellte Klassen [41] zurückgegriffen. Im folgenden soll kurz auf diese Klassen und ihre Verwendung zum Aufbau eines DMRG-Algorithmus eingegangen werden.

Die Klasse **Site** repräsentiert einen einzelnen Gitterplatz und enthält die hierfür benötigten Spin-Matrizen S^+, S^-, S^z .

Aus zwei Objekten vom Typ *Site* kann ein Objekt vom Typ **Edge** aufgebaut werden. *Edge* repräsentiert zwei benachbarte Gitterplätze, die am Rand eines Blocks liegen. Die zwei *Sites* repräsentieren dementsprechend jeweils den äußersten und zweitäußersten Gitterplatz des Blocks, zu dem *Edge* gehört. Diese Klasse wird eingeführt, um auch frustrierte Heisenbergketten behandeln zu können. Die Frustration führt beim Zusammenfügen von zwei Blöcken B, \tilde{B} zu einem Superblock zu zwei zusätzlichen Kopplungstermen für die Wechselwirkung zwischen dem vorletzten (letzten) Spin des linken Blocks und dem ersten (zweiten) Spin des rechten Blocks (vgl. Glg. 3.1) und macht so die Speicherung der Spin-Matrizen für die zweitäußersten Gitterplätze eines Blocks notwendig. Dies geschieht gerade in der Klasse *Edge*.

Die Klasse **Block** beinhaltet neben der Hamiltonmatrix des zu repräsentierenden Blocks die zwei Objekte vom Typ *Edge* (Kante am linken bzw. rechten Rand), die notwendig sind, um zwei Blöcke zu einem Superblock zusammenzusetzen. Die Kante für den linken Rand wird notwendig, wenn periodische

Randbedingungen vorliegen, da in diesem Fall die beiden am linken Rand liegenden Spins des linken Blocks mit den beiden am rechten Rand liegenden Spins des rechten Blocks wechselwirken. In *Block* enthaltene Elementfunktionen ermöglichen es, den Block nach Gleichung 3.1 um einen Gitterplatz zu erweitern (\tilde{B} in Gleichung 3.1 steht dann für den einzelnen Gitterplatz). An dem so entstandenen System kann mit einem weiteren Unterprogramm die Transformation aus Gleichung 3.19 vorgenommen werden, um wieder auf einen entsprechend kleineren Hilbertraum zu projizieren. Voraussetzung hierfür ist, daß die Transformationsmatrix T berechnet wurde, was in der Klasse *Target* geschieht (siehe weiter unten im Text).

Ein **Superblock** setzt sich aus zwei Blöcken zusammen, und dementsprechend benötigt der Konstruktor der Klasse *Superblock* zwei Blöcke, einen linken und einen rechten. Die Klasse verfügt über eine Elementfunktion, die mit Hilfe der in den beiden Teilblöcken enthaltenen Objekte vom Typ *Edge* und der Block-Hamiltonmatrizen die Hamiltonmatrix des Superblocks erzeugt und die von Null verschiedenen Elemente in einer Datenstruktur (*SparseMatrix*) zur Darstellung dünn besetzter Matrizen abspeichert. *Superblock* enthält außerdem eine Diagonalisierungsroutine, die den Targetzustand mit Hilfe des Davidsonalgorithmus [43] bestimmt.

In der Klasse **Target** wird der in *Superblock* berechnete Targetzustand gespeichert und zur Berechnung der Dichtematrix nach (3.15) verwendet. Desweiteren enthält diese Klasse eine Elementfunktion zur Diagonalisierung der Dichtematrix. Die Funktion sortiert zusätzlich die m größten Eigenwerte aus und erzeugt aus den zugehörigen Eigenvektoren die Transformationsmatrix T (vgl. (3.19)).

Kapitel 4

Anwendung: Inkommensurabel modulierte Spin-Peierls-Systeme

In diesem Anwendungsteil soll erläutert werden, wie inkommensurabel dimerisierte Spinketten mittels DMRG behandelt werden können, und es sollen die erhaltenen Resultate diskutiert werden. In Abschnitt 4.1 wird darauf eingegangen, wie man für den rein eindimensionalen Hamiltonian 2.16 durch eine selbstkonsistente Rechnung einen optimalen Satz von Verzerrungen $\{\delta_1, \dots, \delta_N\}$ ermitteln kann. Abschnitt 4.2 gibt eine völlig neue Interpretation der Verzerrungen δ_i , die auf einer antiadiabatischen Betrachtung des ursprünglichen Spin-Peierls-Hamiltonians 2.12 in Kombination mit einer Meanfield-Behandlung von Termen, die benachbarte Ketten koppeln, beruht. Es stellt sich heraus, daß trotz dieser neuen Interpretation das vorher beschriebene Verfahren zur Bestimmung der Verzerrungen nur leicht abgeändert werden muß. Der Einfluß dieser Änderung auf die numerischen Resultate wird am Ende dieses Abschnitts diskutiert. In Abschnitt 4.3 wird gezeigt, wie eine magnetische Zwischenkettenkopplung in die Rechnungen einbezogen werden kann. Der Einfluß dieser Kopplung auf die Form der Solitonen wird untersucht. In Abschnitt 4.4 wird für den elastischen Anteil im Hamiltonian 2.16 eine Dispersion eingeführt und diskutiert, wie diese sich auf die Solitonenbreite auswirkt. Um einen Bezug zu CuGeO_3 zu schaffen, wird in Abschnitt 4.5 eine Zwischenkettenfrustration (vgl. 2.3.4) eingeführt und untersucht, wie diese sich auf die Solitonenbreiten auswirkt. Abschnitt 4.6 geht schließlich unter Verwendung von Parametersätzen aus Referenz [26] auf die Situation in CuGeO_3 ein.

4.1 Iterative Bestimmung der Modulationen

Zur Behandlung des Hamiltonoperators aus Gleichung 2.16 mittels DMRG müssen Verzerrungen $\{\delta_1, \dots, \delta_N\}$ vorgegeben sein. Hier stellt sich die Frage, welches Verzerrungsmuster überhaupt benutzt werden soll. Bei einer vorgegebenen Gesamtmagnetisierung ist es sinnvoll, ein Verzerrungsmuster anzunehmen, bei dem die freie Energie (für unsere Zwecke ist diese mit der Grundzustandsenergie gleichzusetzen, da wir $T = 0$ voraussetzen) des Systems minimal ist. Die in der vorliegenden Arbeit verwendete Methode zur Berechnung einer Modulation mit dieser Eigenschaft wurde erstmalig von Feiguin et al. [44] in Monte-Carlo-Rechnungen benutzt. Weitere ausführliche hierauf basierende Untersuchungen wurden von Schönfeld et al. durchgeführt [45, 46]. Man minimiert dazu den Erwartungswert

$$\langle H_{SP} \rangle = \sum_{i=1}^N (J(1 + \delta_i) \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle + \alpha J \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} \rangle) + \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N \delta_i^2 \quad (4.1)$$

bezüglich $\delta_1, \dots, \delta_N$ unter der Nebenbedingung $\sum_i \delta_i = 0$, die gewährleisten soll, daß keine Translationen der gesamten Kette berücksichtigt werden. Durch einfaches Differenzieren erhält man als Bestimmungsgleichung für die $\{\delta_i\}$ bei minimaler Energie

$$J \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle + K \delta_i - J/L \sum_i \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N \quad (4.2)$$

beziehungsweise:

$$\delta_i = -\frac{J}{K} [\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle - \langle\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle\rangle] \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad (4.3)$$

wobei die doppelten spitzen Klammern für das Mittel der Erwartungswerte über die Kette stehen

$$\langle\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle\rangle := \frac{1}{L} \sum_i \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle. \quad (4.4)$$

Dieser Term sichert gerade die Nebenbedingung $\sum_i \delta_i = 0$.

In Gleichung 4.3 ist zu beachten, daß die rechte Seite von $\delta_1, \dots, \delta_N$ abhängig ist. Denn über die Erwartungswerte geht der Grundzustand des Hamiltonoperators 2.16 ein, der wiederum von den Verzerrungen abhängig ist. Zur Lösung von Glg. 4.3 benutzt man daher das folgende iterative Verfahren:

0. Wähle eine Anfangsmodulation $\delta_i = \delta_i^0$.

1. Erzeuge den Hamiltonian H_{SP} aus Gleichung 2.16 mit der vorgegebenen Modulation und berechne den Grundzustand mittels DMRG.
2. Berechne die Erwartungswerte $\langle S_i S_{i+1} \rangle$ wie in Abschnitt 3.2.4 beschrieben und nach Gleichung 4.3 die Verzerrungen $\{\delta_i^{neu}\}$.
3. Ersetze die alten Verzerrungen $\{\delta_i\}$ durch die in Punkt 2 berechneten.
4. Fahre mit Schritt 1 fort.

Die Wahl der Anfangsverzerrung ist davon abhängig, welche Phase behandelt werden soll. In der D-Phase wählt man $\delta_i = (-1)^i \delta$, mit einer Schätzung für δ . In der I-Phase ist das Verzerrungsprofil komplizierter. Gleichung 2.19 ergibt in Fourierdarstellung [33]

$$\begin{aligned} \delta(r_i) &\sim \operatorname{sn}\left(\frac{r_i}{k_d \xi_d}, \xi_d\right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sin((2n+1)qr_i), \end{aligned} \quad (4.5)$$

mit

$$\begin{aligned} q &= \pi + \frac{\pi}{2k_d K(k_d) \xi_d} \\ &= \pi(1+2m), \end{aligned} \quad (4.6)$$

wobei im letzten Schritt die Relation 2.20 benutzt wurde. Die Koeffizienten a_n klingen sehr schnell ab. So wurde in Röntgenstreuexperimenten [34] $|a_1/a_0| \sim 0.07$ erhalten, so daß eine sinusförmige Anfangsverzerrung mit dem Wellenvektor q aus Gleichung 4.6 eine naheliegende Wahl ist [47, 45]

$$\delta_i^0 = \delta \cos(qr_i). \quad (4.7)$$

Für verschwindende Magnetisierung gilt $q = \pi$, und Gleichung 4.7 geht in $\delta_i = (-1)^i \delta$ über. Die Magnetisierung pro Gitterplatz m ist hierbei ein Maß für die Inkommensurabilität des Systems. Das oben beschriebene Verfahren wird abgebrochen, wenn das Verzerrungsmuster sich nicht mehr signifikant ändert. Interessiert man sich für die lokale Magnetisierung, so müssen am Ende wie in Abschnitt 3.2.4 angegeben die Erwartungswerte $\langle S_i^z \rangle$ berechnet werden. In Abbildung 4.1 sind Verzerrungsmuster und lokale Magnetisierungen, die auf diese Weise nach 10 Schritten erhalten wurden, gezeigt. Als Maß für die Konvergenz

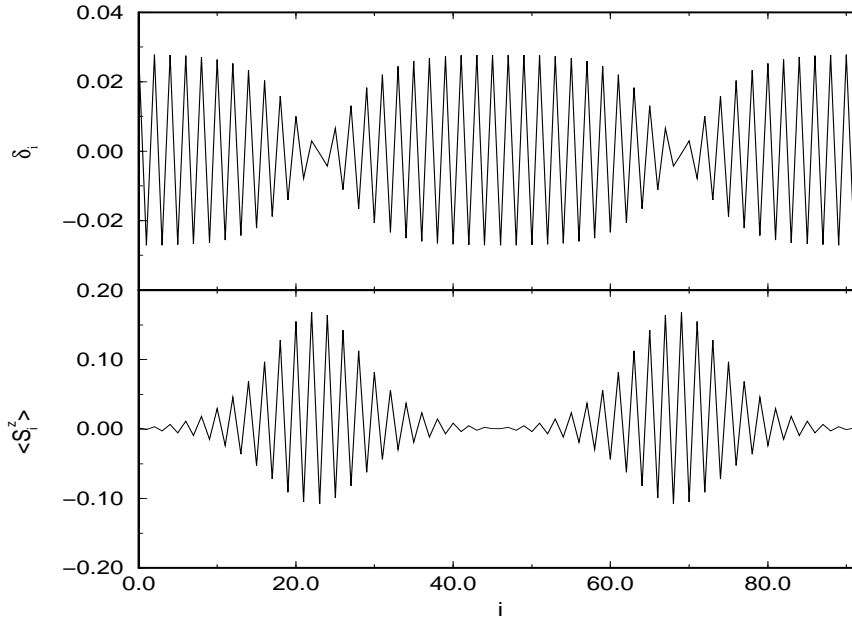


Abbildung 4.1: Lokale Verzerrungen δ_i und lokale Magnetisierung $\langle S_i^z \rangle$ einer Kette mit $L = 92$, $\alpha = 0.35$, $K = 10.2$ nach 10 Schritten.

kann das Maximum der Abweichungen der Verzerrungen aus dem letzten Schritt zum vorletzten Schritt benutzt werden. Für die Rechnung, mit der Abb. 4.1 erhalten wurde, ergibt sich hierfür ein Wert von etwa $10^{-4} \delta_{m,ax}$.

Um anhand der berechneten δ_i, m_i die für die Solitonen charakteristischen Amplituden, δ, W, R und Breiten ξ_d, ξ_m zu erhalten, muß ein Parameterfit mit den Funktionen aus Glgn. 2.18, 2.19 durchgeführt werden. Wegen der Relation 2.20 kann einer der Parameter berechnet werden. Man muß jedoch beachten, daß berechnete (oder auch experimentell erhaltene) Ausdrücke im allgemeinen noch vom Ursprung verschoben sind, so daß ein zusätzlicher Fitparameter r_0 für diese Verschiebung eingeführt werden muß. Für die Verzerrung bietet sich ein Drei-Parameterfit mit den Fit-Parametern δ, k_d, r_0 an. Die elastische Solitonenbreite wird dann nach Glg. 2.20 berechnet. Für die lokale Magnetisierung kann ebenso vorgegangen werden. Fitparameter sind hier die Amplituden W, R , der Modulus k_m und die Verschiebung r_0 des Solitons vom Ursprung. Auch hier kann die Solitonenbreite ξ_m aus Glg. 2.20 berechnet werden. In Referenz [46] wurden DMRG-Daten, die mit dem oben beschriebenen selbstkonsistenten Verfahren erhalten wurden, mit diesem Vorgehen ausgewertet, um die erhaltenen

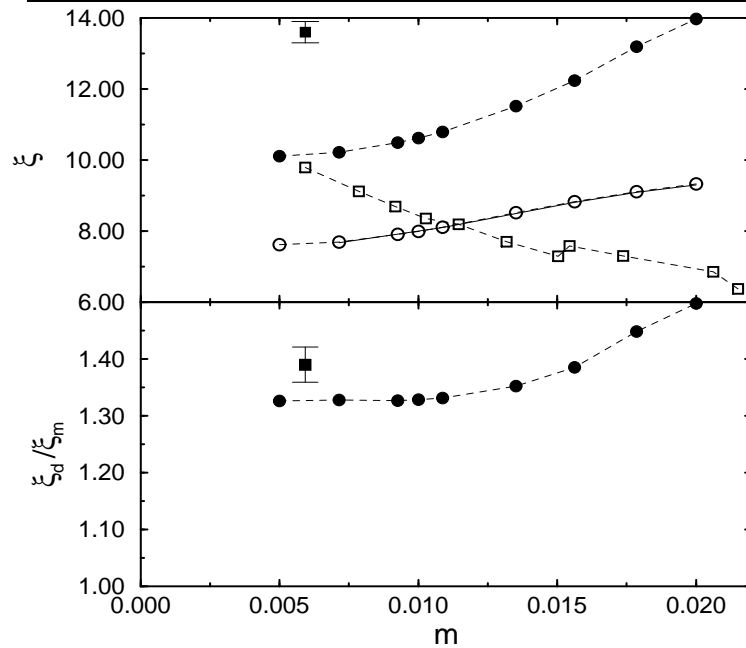


Abbildung 4.2: Solitonenbreiten nach Ref. [46] ($K = 18$, $\alpha = 0.35$). Oberer Teil: Kreise sind DMRG-Daten, Quadrate experimentelle Daten. Leere Symbole stehen für magnetische Solitonenbreiten ξ_m , gefüllte Symbole für elastische Breiten ξ_d . Die offenen Quadrate sind NMR-Resultate für ξ_m aus [37], das gefüllte Quadrat basiert auf den Röntgenstreuungsdaten aus Ref. [48]. Unterer Teil: Verhältnis von elastischer zu magnetischer Solitonenbreite. Kreise: DMRG-Daten, Quadrat: experimenteller Wert.

Parameter W , R , ξ_d , ξ_m mit experimentellen Daten [34, 36, 37] zu vergleichen. Da die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten DMRG-Rechnungen direkt an die Untersuchung von Uhrig et al. [46] anknüpfen, soll diese hier kurz diskutiert werden.

Die erhaltenen Solitonenbreiten und deren Verhältnisse sind in Abb. 4.2 zusammen mit den experimentellen Werten gegen die mittlere Magnetisierung aufgetragen. Die DMRG-Resultate liegen in der richtigen Größenordnung und zeigen, daß die magnetischen Breiten, wie auch im Experiment, nicht mit den elastischen Breiten übereinstimmen, sondern deutlich niedriger als diese liegen. Der monoton steigende Verlauf insbesondere der magnetischen Breiten steht jedoch im Widerspruch zum Experiment, das ein monoton abfallendes Verhalten der magnetischen Breiten mit steigender Magnetisierung zeigt. Für die elastische Solitonenbreite liegt leider nur ein experimenteller Wert bei einer Magnetisierung von ca. $1/140$ vor [34].

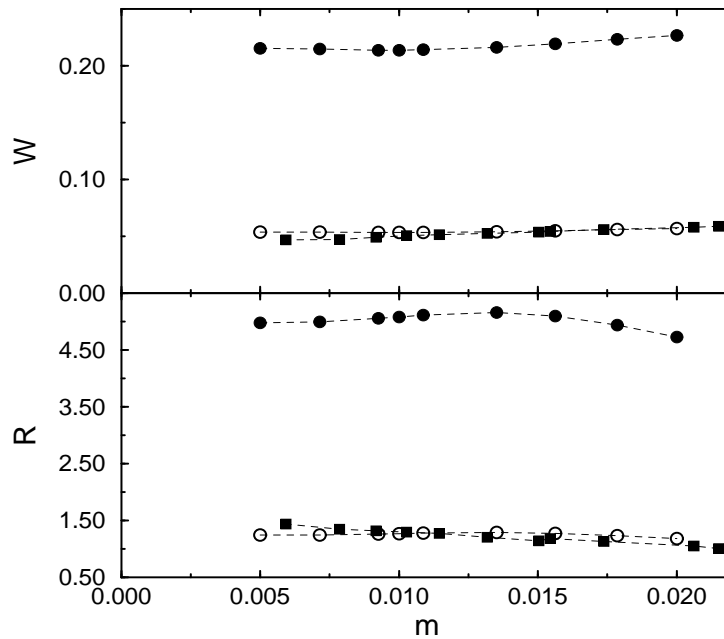


Abbildung 4.3: Amplituden W, R nach Ref. [46] ($K = 18$, $\alpha = 0.35$). Volle Kreise sind DMRG-Resultate, volle Quadrate NMR-Daten [37]. Die offenen Kreise sind die um den Faktor 0.25 renormierten DMRG-Amplituden.

In Abb. 4.3 sind die zugehörigen Amplituden W , R der lokalen Magnetisierung (vgl. Glg. 2.18, 2.19) aufgetragen. Der qualitative Verlauf der DMRG-Amplituden stimmt mit dem der experimentellen Amplituden überein, jedoch liegen sowohl W als auch R etwa um einen Faktor 4 zu hoch. Dies bedeutet, daß der alternierende Anteil der lokalen Magnetisierung entsprechend renormiert werden müßte. Die Amplitude des uniformen Anteils W/R liegt in der richtigen Größenordnung, weicht jedoch immer noch um bis zu 35% von den experimentellen Werten ab (vgl. Abb. 4.4). Uhrig et al. [46] führen die Abweichung von W und R auf Nullpunktsschwankungen des Solitonengitters („Phasonen“) zurück, die als dynamischer Effekt der DMRG-Behandlung nicht zugänglich sind. Diese Oszillationen führen zu einer Mittelung der Amplitude W des alternierenden Anteils der lokalen Magnetisierung, während der uniforme Anteil W/R nicht beeinflusst wird. Die Mittelung kann durch Renormierung der alternierenden Amplitude um einen Faktor γ' berücksichtigt werden. Um zu gewährleisten, daß die homogene Amplitude W/R nicht beeinflusst wird, muß R um denselben Faktor renormiert werden. In Ref. [46] wird dieser Renormierungsfaktor zu $\gamma' \simeq 0.16$ berechnet, was darauf hinweist, daß die DMRG-Resultate für W und R , die um ~ 0.25 renormiert werden müssen, noch etwas zu niedrig liegen. Die Übereinstimmung

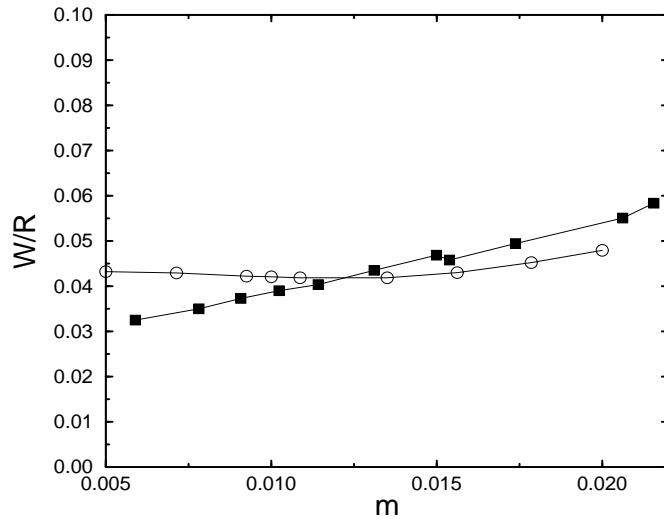


Abbildung 4.4: Amplitude des uniformen Anteils W/R der lokalen Magnetisierung aus den Daten in Ref. [46]. Die Kreise stehen für die DMRG-Daten, die Quadrate für die experimentellen Daten aus Ref. [37].

kann jedoch durch die Wahl eines kleineren Wertes für K (d.h. eines größeren δ) verbessert werden.

Die Analyse der DMRG-Resultate weist eine Inkonsistenz zu Gleichung 2.21 auf. Setzt man die für eine bestimmte Magnetisierung erhaltenen Werte für W, R, ξ_m, k_m in diese Gleichung ein, so ergibt sich *nicht* die korrekte Magnetisierung. Um dieses Defizit zu beheben, muß für die lokale Magnetisierung ein etwas allgemeinerer Ausdruck als der in Gleichung 2.19 angegebene verwendet werden. Dort wurde angenommen, daß diese sich aus einem uniformen ($\sim W/2R$) und einem alternierenden ($\sim W/2$) Anteil zusammensetzt, die beide dieselbe Solitonenbreite ξ_m aufweisen. Dieses Bild trifft jedoch nicht ganz zu. Uhrig [49, 50] weist darauf hin, daß zwischen der Solitonenbreite ξ_m^{al} des alternierenden Anteils und der des uniformen Anteils ξ_m^{un} unterschieden werden muß. Anhand einer erweiterten Kontinuumstheorie erhält er bei kritischer Frustration ($\alpha_c \sim 0.241$ [51]) $\xi_m^{al}/\xi_m^{un} \sim 1.14$ [50]. Entsprechend müssen zwei verschiedene Moduli k_m^{un}, k_m^{al} eingeführt werden. Gleichung 2.20 ist dann sowohl für ξ_m^{al}, k_m^{al} als auch für ξ_m^{un}, k_m^{un} gültig. Gleichung 2.21 gilt hingegen nur für ξ, k aus dem uniformen Anteil der lokalen Magnetisierung, da nur dieser zur mittleren Magnetisierung m beiträgt. Um dies zu berücksichtigen, muß die in Referenz [15] benutzte einfa-

che Analyse, die keine Unterscheidung zwischen alternierendem und uniformem Anteil der Magnetisierung machte, erweitert werden. Die Fitfunktionen lauten nun

$$m_i = \frac{W}{2} \left\{ \frac{1}{R} \operatorname{dn} \left(\frac{r_i - r_0}{k_m^{\text{un}} \xi_m^{\text{un}}}, k_m^{\text{un}} \right) + (-1)^i \operatorname{cn} \left(\frac{r_i - r_0}{k_m^{\text{al}} \xi_m^{\text{al}}}, k_m^{\text{al}} \right) \right\}. \quad (4.8)$$

Der Parameter r_0 gibt die Verschiebung der ersten Nullstelle zum Ursprung an. Die Fitparameter in dieser gemischten Analyse bleiben $W, R, r_0, k_m^{\text{alt}}$. k_m^{un} wird aus Gleichung 2.21 berechnet und die Solitonenbreiten $\xi_m^{\text{al}}, \xi_m^{\text{un}}$ nach wie vor aus Gleichung 2.20. Mit diesem Vorgehen wurden die in Referenz [46] berechneten

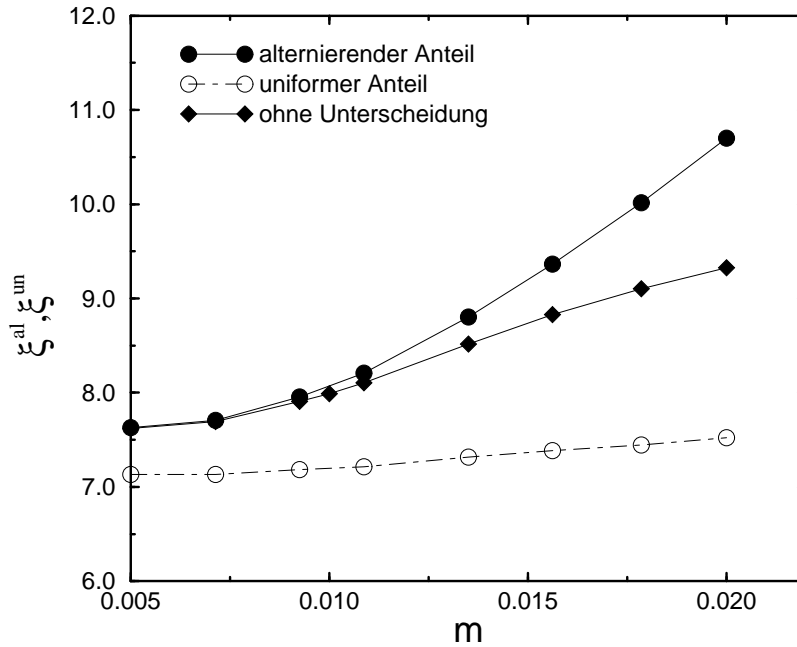


Abbildung 4.5: aus einer gemischten Analyse (nach Gleichung 4.8) der Daten aus Ref. [46] ($K = 18, \alpha = 0.35$) erhaltene magnetische Solitonenbreiten im Vergleich zu den ohne Unterscheidung von ξ_m^{al} und ξ_m^{un} erhaltenen.

m_i neu ausgewertet. Die so erhaltenen Breiten $\xi_m^{\text{al}}, \xi_m^{\text{un}}$ sind in Abb. 4.5 zusammen mit den ξ_m aus der zitierten Arbeit in Abb. 4.5 dargestellt. Bei kleinen

Magnetisierungen stimmt das Ergebnis für ξ_m aus der einfachen Analyse gut mit der Breite ξ^{al} aus der gemischten Analyse überein, was auch zu erwarten war, da der alternierende Anteil den uniformen Anteil stark überwiegt. Bei größeren Magnetisierungen wächst jedoch ξ^{al} bedeutend stärker an. Die Breite des uniformen Anteils ξ^{un} ist nahezu unabhängig von der Magnetisierung und liegt deutlich unterhalb von ξ^{al} . Das Verhältnis ξ^{al}/ξ^{un} steigt von ~ 1.06 bei $m = 0.005$ bis auf ~ 1.42 bei der höchsten betrachteten Magnetisierung. Die Bedeutung einer gemischten Analyse wird auch durch die Qualität der Fits unterstrichen. Bei der gemischten Analyse erhält man $^1\chi^2 \sim 10^{-5}$, während die einfache Analyse um ein bis zwei Größenordnungen schlechter liegt. An dieser Stelle sei jedoch bemerkt, daß auch der allgemeinere Ausdruck in Glg. 4.8 nur eine Approximation für die tatsächliche Form der lokalen Magnetisierung darstellt.

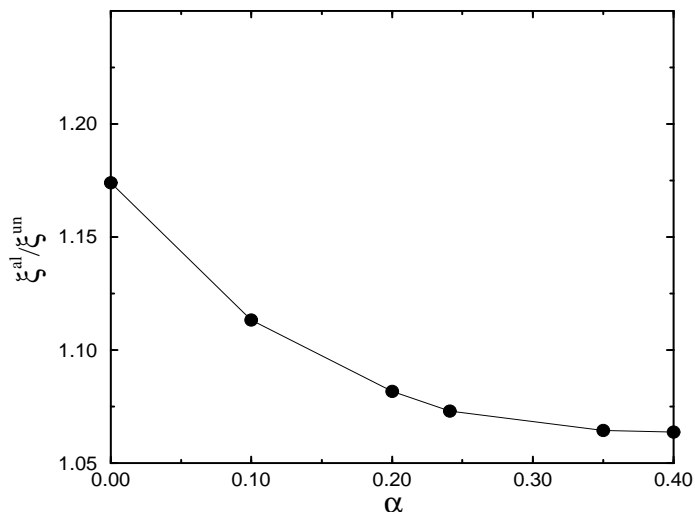


Abbildung 4.6: Verhältnis der Breiten von alternierendem zu uniformem Anteil der lokalen Magnetisierung in Abhängigkeit der Frustration. K wurde jeweils so gewählt, daß die Amplitude der Dimerisierung etwa bei $\delta \simeq 0.027$ liegt. Die genauen Werte für (α, K) sind in Tabelle B.2 aufgeführt.

Aufgrund der im letzten Absatz geschilderten Beobachtung müssen auch die experimentellen Werte aus Referenz [37] neu überdacht werden. Dort wurde ebenso wie in Referenz [46] nur eine magnetische Solitonenbreite angenommen,

¹ χ^2 =Summe der Quadrate der Abweichungen der Originaldaten von Fitfunktion

d.h. die dort ermittelte Solitonenbreite liegt nahe bei der in unserer Notation mit ξ_m^{al} bezeichneten. Diese Breite wurde jedoch zusammen mit den erhaltenen Werten für W, R benutzt, um die Magnetisierung der Probe nach Gleichung 2.21 zu berechnen. Diese Gleichung gilt jedoch nur für den uniformen Anteil der Magnetisierung, und die DMRG-Daten deuten darauf hin, daß die Abweichung zwischen ξ^{al} und ξ^{un} schon ausreicht, um das Ergebnis für die Magnetisierung stark zu verfälschen.

Neben der mittleren Magnetisierung beeinflußt auch die Frustration α das Verhältnis der Breiten von alternierendem zu uniformem Anteil der lokalen Magnetisierung. Abbildung 4.6 zeigt den Verlauf von $\xi^{\text{al}}/\xi^{\text{un}}$ in Abhängigkeit der Frustration bei einer Magnetisierung von $m = 1/140$, wobei K jeweils so gewählt wurde, daß die Amplitude der Dimerisierung etwa konstant bleibt.

Der Unterschied zwischen den beiden Breiten ist bei verschwindender Frustration maximal ($\sim 17\%$) und sinkt bei steigender Frustration bis auf einen Wert von ca. 6% bei $\alpha = 0.4$. Ein Vergleich dieser Aussagen mit der erweiterten Kontinuumstheorie [49] ist wünschenswert.

4.2 Bezug zur antiadiabatischen Phononenbehandlung

In Abschnitt 2.3.3 wurde bereits darauf hingewiesen, daß die adiabatische Behandlung, die auf den Hamiltonian 2.16 führt, für CuGeO_3 nicht durch das Vorhandensein von „langsamen Phononen“ gerechtfertigt ist. In Anbetracht der Energieskalen des Phononensystems und des magnetischen Systems erscheint sogar eine antiadiabatische Behandlung realistischer (vgl. Abschnitt 2.3.3). In Referenz [15] führt Uhrig eine solche durch. Durch eine unitäre Transformation, die die Spin-Phonon-Kopplungsterme im vollen Spin-Peierls-Hamiltonian beseitigt, ergibt sich ein effektiver Spinhamiltonoperator, in dem durch die antiadiabatische Behandlung der Phononen zusätzlich zum reinen Spinanteil $H_S = \sum_i J S_i S_{i+1} + \alpha J S_i S_{i+2}$ die folgenden Terme auftreten:

$$\Delta H_X = -\frac{1}{\omega} \sum_{i,j} A_{i,j}^+ A_{i,j} \quad (4.9)$$

$$\Delta H_Y = \frac{1}{2\omega^2} \coth\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sum_{i,j} [A_{i,j}^+, [H_S, A_{i,j}]] \quad (4.10)$$

mit

$$A_{i,j} = g(S_{i+1,j} S_{i,j} + f \sum_{\pm} S_{i+1,j\pm 1} S_{i,j\pm 1}) \quad (4.11)$$

Der erste Term ΔH_X ist von der Ordnung $O(g^2/\omega)$, der zweite von der Ordnung $O(g^2 J/\omega^2)$. Terme höherer Ordnung in g/ω bzw. J/ω wurden vernachlässigt. Der Index i durchläuft Gitterplätze innerhalb einer festen Kette, und j numeriert verschiedene benachbarte Ketten. Die Konstante g steht für die Stärke der Spin-Phonon-Kopplung. Der zu f proportionale Term ergibt sich dadurch, daß berücksichtigt wurde, daß eine Verzerrung der Kette $j \pm 1$ an die Spins der Kette j koppeln kann (vgl. Abschnitt 2.3.3). Für $f = 0$ ist der Effekt nur eine Renormierung der Kopplungskonstanten J und α , da in ΔH_X und ΔH_Y nur Konstanten und Terme, die proportional zu $S_i S_{i+1}$ bzw. $S_i S_{i+2}$ sind, auftreten. Der zu f proportionale Term in Glg. 4.11 erzeugt in ΔH_Y wegen des Kommutators nur Produkte von Spinoperatoren auf derselben Kette, was ebenfalls nur zu einer Renormierung von J und α führt. In ΔH_X tritt jedoch zusätzlich ein Term auf, der benachbarte Ketten koppelt

$$H_{\text{int}} = -\frac{2g^2 f}{\omega} \sum_{i,j} (S_{i+1,j} S_{i,j}) (S_{i+1,j+1} S_{i,j+1}) \quad (4.12)$$

Für CuGeO_3 können wir annehmen, daß für die auftretende Kopplung $g^2 f / \omega \ll 1$ gilt, was bedeutet, daß die elastische Zwischenkettenkopplung klein ist gegenüber der Energie ω der relevanten Phononenmode. Dies rechtfertigt eine Mean-Field-Behandlung von H_{int} . Hierbei wird in Gleichung 4.12 das Operatorprodukt $\mathbf{S}_{i+1,j+1} \mathbf{S}_{i,j+1}$ auf einer Kette durch seinen Erwartungswert ersetzt. Der Beitrag einer Kette j zu H_{int} lautet dann [49]

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}^j &= \sum_i \left\{ -\frac{2g^2 f}{\omega} \sum_{\pm} \langle \mathbf{S}_{i+1,j\pm 1} \mathbf{S}_{i,j\pm 1} \rangle \right\} \mathbf{S}_{i+1,j} \mathbf{S}_{i,j} \\ &= \sum_i J \delta_i \mathbf{S}_{i+1,j} \mathbf{S}_{i,j} , \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit

$$\delta_i = -\frac{2g^2 f}{\omega J} \sum_{\pm} \langle \mathbf{S}_{i+1,j\pm 1} \mathbf{S}_{i,j\pm 1} \rangle . \quad (4.14)$$

Der auf diese Weise erhaltene effektive Hamiltonian hat dieselbe Form wie der adiabatische Hamiltonian 2.16. Der einzige Unterschied ist, daß die δ_i in der antiadiabatischen Behandlung anders interpretiert werden müssen. Die Kopplungskonstanten α und J erfahren durch die Eliminierung des Phononensystems eine Renormierung, und die δ_i sind nicht als Korrektur von J , die durch die Auslenkung der Spins längs der Kette zustandekommt, zu verstehen. Vielmehr kommen die δ_i durch die Kopplung der Verzerrung einer Kette an die Spins der benachbarten Kette zustande, was auch am Vorfaktor f in Gleichung 4.14 zu erkennen ist. Behandelt man verschiedene Ketten gleich („Ketten-Mean-Field“), so geht die Analogie noch weiter. Setzt man

$$K_{\text{eff}} = \left| \frac{\omega J^2}{4g^2 f} \right| , \quad (4.15)$$

so ergibt sich

$$\delta_i = -\text{sgn}(f) \frac{J}{K} \langle \mathbf{S}_{i+1,j+1} \mathbf{S}_{i,j+1} \rangle . \quad (4.16)$$

Abgesehen vom Vorfaktor $\text{sgn}(f)$ entspricht dies gerade Gleichung 4.3 (Die Konstante $\langle \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \rangle \rangle$ bedeutet nur eine Renormierung von J). Für CuGeO_3 ist bekannt, daß in der D-Phase benachbarte Ketten entgegengesetzt dimerisieren (vgl. Abschnitt 2.3.4), so daß $\text{sgn}(f) = -1$ angenommen werden muß. Gleichungen 4.16 und 4.3 unterscheiden sich also um ein Vorzeichen. Das oben beschriebene Verfahren zur selbstkonsistenten Bestimmung kann so neu interpretiert werden als Behandlung des Zwischenkettenkopplungsterms aus Gleichung

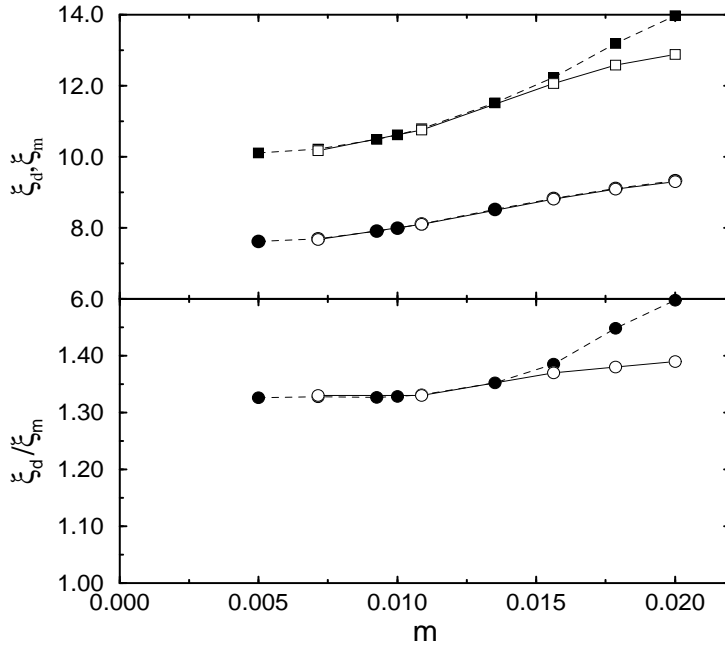


Abbildung 4.7: Elastische und magnetische Solitonenbreiten in Abhängigkeit der mittleren Magnetisierung m mit $K = 18$, $\alpha = 0.35$. Im oberen Teil sind die Solitonenbreiten ξ_d (Quadrate) und ξ_m (Kreise) zu sehen und im unteren Teil die Verhältnisse ξ_d/ξ_m . Die gefüllten Symbole sind frühere Daten [46], die offenen Symbole wurden mit der am Ende von Abschnitt 4.2 beschriebenen Modifikation gewonnen.

4.12 in einer Ketten-Mean-Field-Näherung. Zur Behandlung von CuGeO_3 muß hierbei noch das Vorzeichen der δ_i in jedem Schritt umgekehrt werden, da jede Kette mit ihrer entgegengesetzt dimerisierten Nachbarkette wechselwirkt. In der D-Phase hat dies keinen Einfluß auf die Dimerisierung, da der Hamiltonoperator 2.16 mit $\delta_i = (-1)^i \delta_0$ gegenüber einer solchen Transformation invariant ist. Bei inkommensurabler Modulation ist dies nicht mehr der Fall, und wir erwarten, daß der Effekt um so größer wird, je höher die Inkommensurabilität des Systems ist. Ein Maß für die Inkommensurabilität des Systems ist $d = |q - \pi| = 2\pi m$, wobei $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^z \rangle$ für die mittlere Magnetisierung steht [47]. Abbildung 4.7 zeigt Solitonenbreiten, die mit Umkehrung des Vorzeichens in jedem Schritt gewonnen wurden, zusammen mit den Breiten aus Referenz [46]. Man erkennt, daß die magnetischen Breiten ξ_m kaum beeinflusst werden. Wie erwartet wird auch ξ_d für niedrige Magnetisierung kaum beeinflusst. Ab etwa $m \geq 0.015$ erhalten wir jedoch signifikant niedriger liegende Breiten. Für kleine m ergibt der antiadia-

batische Zugang also im wesentlichen dieselben Resultate wie der adiabatische.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die selbstkonsistente Behandlung des adiabatischen Hamiltonians 2.16 äquivalent ist zu einer Kettenmeanfield-Behandlung von Termen, die sich aus einer im Falle von CuGeO_3 realistischeren antiadiabatischen Phononenbehandlung ergibt. Der einzige Unterschied, die Umkehrung des Vorzeichens der δ_i in jedem Schritt, beeinflußt nur die elastischen Solitonenbreiten bei relativ hoher Magnetisierung. Hierdurch wird die Verwendung des adiabatischen Hamiltonians 2.16 im nachhinein auch für den antiadiabatischen Grenzfall gerechtfertigt. Es ist zu erwarten, daß diese Art der Behandlung auch zwischen den beiden Grenzfällen eine gute Interpolation darstellt.

4.3 Einfluß einer Zwischenkettenkopplung

Die Beschreibung von CuGeO_3 als magnetisch eindimensionales System durch den Hamiltonoperator 2.16 ist, wie bereits in Abschnitt 2.3.4 bemerkt, nur eine Näherung. Für eine genauere Beschreibung muß der Austausch in b -Richtung (μJ), der immerhin 10-30% der magnetischen Kopplung innerhalb der Ketten ausmacht [21, 22, 26], hinzugezogen werden. Hierzu muß der magnetische Anteil des Hamiltonoperators 2.16 um den Term $H_\mu = \mu J \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i,j+1}$ zu

$$H = \sum_{i,j} J(1 + \delta_i) \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+1,j} + \alpha J \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i+2,j} + \mu J \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i,j+1} \quad (4.17)$$

erweitert werden. Der Index j numeriert hier die verschiedenen Ketten, während i weiterhin die Spins einer einzelnen Kette durchläuft. Um die Zwischenkettenkopplung in die DMRG-Rechnungen einbeziehen zu können, wenden wir eine Mean-Field-Näherung auf die Kopplungsterme an, d.h. wir ersetzen $\mathbf{S}_{i,j} \mathbf{S}_{i,j+1}$ durch $S_{i,j}^z \langle S_{i,j+1}^z \rangle =: S_{i,j}^z m_{i,j}$. Die Zwischenkettenkopplung wird also durch ein lokales Magnetfeld, das von den Spins der Nachbarkette herrührt, ersetzt. Hierdurch wird das zweidimensionale Problem 4.17 wieder auf ein eindimensionales reduziert, wobei nun jedoch die zusätzliche Selbstkonsistenzbedingung $m_{i,j} = \langle S_{i,j}^z \rangle$ erfüllt werden muß. Der zu behandelnde Hamiltonoperator einer Kette lautet nun

$$H = \sum_{i=1}^N J(1 + \delta_i) \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \alpha J \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} + Z\mu J m_i S_i^z + \frac{K}{2} \sum_{i=1}^N \delta_i^2. \quad (4.18)$$

Der Faktor Z im dritten Term steht für die Koordinationszahl und wird im folgenden immer auf $Z=2$ gesetzt, um zu berücksichtigen, daß jede Kette in der

b-c-Ebene zwei Nachbarketten hat. Die Wechselwirkung in a-Richtung soll hier nicht berücksichtigt werden, da diese um etwa zwei Größenordnungen schwächer ist als die innerhalb der Ketten (vgl. Abschnitt 2.3.4).

Der Hamiltonoperator 4.18 wird nun ähnlich wie in Abschnitt 4.1 selbstkonsistent behandelt. Benachbarte Ketten werden auch hier wie in Abschnitt 4.2, abgesehen von der Umkehrung der Modulationen in jedem Schritt, gleich behandelt, d.h. für die m_1, \dots, m_N werden die Erwartungswerte $\langle S_i^z \rangle$ derselben Kette eingesetzt. Da diese wieder vom Grundzustand des Hamiltonoperators 4.18 abhängen, werden hier, ebenso wie zur Berechnung der Dimerisierung in Abschnitt 4.1, Anfangswerte festgelegt. In den weiteren Schritten wird dann jeweils der Hamiltonoperator 4.18 erzeugt, wobei für die m_i die im vorhergehenden Schritt berechneten Erwartungswerte $\langle S_i^z \rangle$ eingesetzt werden. Die im i -ten Schritt berechnete Kette wird als Nachbar der im vorhergehenden Schritt berechneten angesehen. Wie in Abschnitt 4.2 bereits erläutert, werden daher in jedem Schritt die $\{\delta_i\}$ umgekehrt.

Das in Abschnitt 4.1 angegebene Verfahren wird wie beschrieben erweitert:

0. Wähle eine Anfangsmodulation und Anfangsmagnetisierungen z.B. $m_i = 0$, $\delta_i = \cos(qi)$, mit $q = \pi(1 + 2m)$.
1. Erzeuge den Hamiltonoperator aus Gleichung 4.18 mit der vorgegebenen Modulation und den Magnetisierungen m_i , und berechne den Grundzustand mittels DMRG.
2. Berechne die Erwartungswerte $\langle S_i S_{i+1} \rangle$, $m_i^{\text{neu}} = \langle S_i^z \rangle$, wie in Abschnitt 3.2.4 beschrieben. Berechne $\{\delta_i^{\text{neu}}\}$ nach Gleichung 4.3.
3. Ersetze die alten $\{\delta_i\}$ durch $\{-\delta_i^{\text{neu}}\}$ und die $\{m_i\}$ durch $\{m_i^{\text{neu}}\}$.
4. Fahre mit Schritt 1 fort.

Der Einfluß der Zwischenkettenkopplung auf Solitonen wurde von Zang et al. [32] in einem Molekularfeldzugang mittels Bosonisierung untersucht. Die Autoren erhielten Ausdrücke wie in (2.17) ohne Unterscheidung zwischen magnetischer und elastischer Solitonenbreite. Die Zwischenkettenkopplung führte auf eine Renormierung der Solitonenbreite, und es konnte gezeigt werden, daß die Zwischenkettenkopplung die Solitonenbreiten deutlich vergrößert. Die Vergrößerung der Breiten ist qualitativ leicht verständlich, da durch die Zwischenkettenkopplung die magnetischen Solitonen an benachbarten Ketten antiferromagnetisch

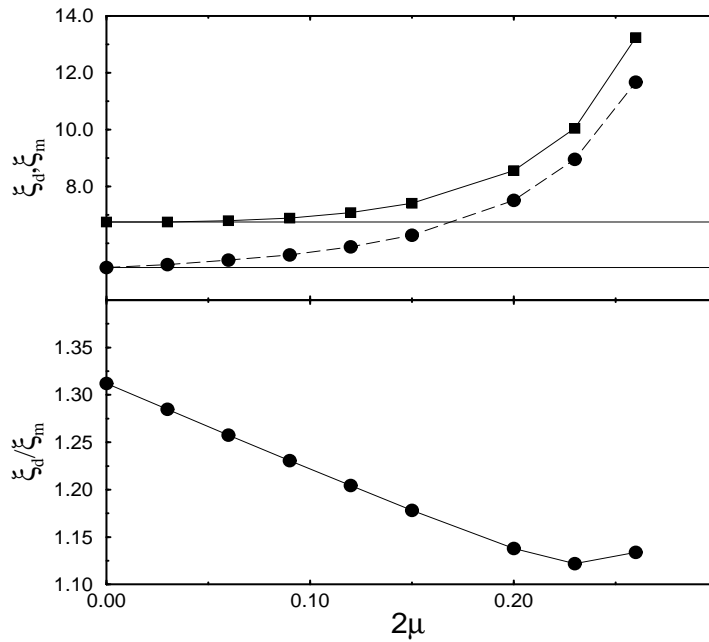


Abbildung 4.8: Elastische und magnetische Solitonenbreiten einer Kette mit $L=140$, $m=1/140$, $K=10.2$, $\alpha = 0.35$ in Abhängigkeit der Zwischenkettenkopplung μ . Im oberen Teil sind die die Breiten ξ_d (Quadrate) und ξ_m (Kreise) zu sehen, der untere Teil zeigt die Verhältnisse. (einfache Analyse)

koppeln und bei einem um einen Gitterplatz versetzten Magnetisierungsprofil eine um so niedrigere Energie erreicht werden kann, je breiter die Solitonen sind.

Auch die experimentellen Tatsachen weisen darauf hin, daß die tatsächlichen Solitonenbreiten höher liegen als die, die man durch theoretische oder numerische Untersuchungen anhand von rein eindimensionalen Modellen erhält. So wird in Ref. [32] ohne Zwischenkettenkopplung ein Wert von $\xi \simeq 8a$ angegeben, was im Vergleich zu der experimentellen Breite von $\xi = 13.6a$ [34] viel zu niedrig ist. Auch die in Abb. 4.2 gezeigten DMRG-Daten für die Solitonenbreiten liegen vor allem bei kleinen Magnetisierungen zu niedrig.

Mit der beschriebenen Methode wurde der Einfluß der Zwischenkettenkopplung auf die Verzerrungen und die lokale Magnetisierung für verschiedene Werte von μ untersucht. In Abbildung 4.8 sind für eine Kette mit 140 Gitterplätzen und zwei Solitonen die Solitonenbreiten in Abhängigkeit von μ dargestellt. Man erkennt deutlich, daß wie erwartet sowohl die elastische als auch die magnetische Solitonenbreite mit größer werdender Zwischenkettenkopplung wachsen. Die elastische Solitonenbreite bleibt zunächst nahezu konstant, während ξ_m für kleine μ linear ansteigt. Die naheliegende Erklärung ist, daß die Zwischenkettenkopp-

lung sich direkt nur auf den magnetischen Anteil der Solitonen auswirkt, während der elastische Anteil nur indirekt beeinflusst wird. Das Verhältnis ξ_d/ξ_m sinkt zunächst linear und bewegt sich damit vom experimentellen Wert in CuGeO_3 , der bei $\xi_d/\xi_m \simeq 1.4$ liegt (vgl. Abb. 4.3), weg. Bei Zwischenkettenkopplungen von $2\mu > 0.2$ beginnt das Verhältnis vom linearen Verhalten abzuweichen, der Wert für $2\mu = 0.26$ liegt sogar höher als der für $2\mu = 0.23$. Dies könnte ein Hinweis darauf sein, daß unsere Mean-Field-Behandlung hier an ihre Grenzen stößt, was auch durch die Tatsache gestützt wird, daß bei weiterer Erhöhung die Solitonenbreiten zu explodieren beginnen und die Qualität der Fits deutlich schlechter wird.

Übereinstimmung mit den experimentellen Breiten kann durch Variieren von μ nicht erreicht werden, da das Verhältnis ξ_d/ξ_m sich mit steigender Zwischenkettenkopplung vom experimentellen Wert wegbewegt. Der experimentelle Wert $\xi_d \sim 13.6$ aus Referenz [34] ist jedoch als weitaus unsicherer anzusehen als die Daten aus Referenz [37]. Um nur mit der magnetischen Solitonenbreite, für die man aus Abb. 4.2 bei $m = 1/140$ einen Wert von $\xi_m \simeq 9.37$ extrapoliert, Übereinstimmung zu erreichen, muß für die Zwischenkettenkopplung ein Wert von $2\mu \simeq 0.235$ angenommen werden.

In Abbildung 4.9 sind die Amplituden W , R des magnetischen Anteils des Solitons (vgl. Gleichungen 2.18, 2.19) und deren Verhältnis in Abhängigkeit der Zwischenkettenkopplung dargestellt. Die Amplitude des alternierenden Anteils der Magnetisierung steigt linear, während der uniforme Anteil W/R sinkt. Durch den Anstieg des alternierenden Teils gewinnt das System an Zeemanenergie, während der Abfall der uniformen Amplitude konstant bleibende Magnetisierung trotz größer werdender Ausdehnung der Spinonen ξ_m gewährleistet. Für den anhand der magnetischen Solitonenbreite weiter oben vorgeschlagenen Wert der Zwischenkettenkopplung $2\mu = 0.235$ ergibt sich $W/R \simeq 0.034$. Dieser Wert paßt recht gut zu den experimentellen Werten bei den niedrigeren Magnetisierungen. Für die drei niedrigsten Magnetisierungen, die in Ref. [37] betrachtet wurden, liegt W/R zwischen 0.033 und 0.037. Ein genauere Vergleich ist wegen der Unsicherheit der Werte für die Magnetisierungen (vgl. Abschnitt 4.1) nicht möglich.

Dieselben Rechnungen wurden für eine bedeutend höhere Magnetisierung von $m=2/100$ durchgeführt, um zu sehen, ob das Einschalten der Zwischenkettenkopplung dazu führt, daß die Solitonenbreiten, wie im Experiment, mit größer werdender Magnetisierung sinken. Dies ist leider nicht der Fall, wie man anhand von Abb. 4.10 erkennt. Hier sind die elastischen (oberer Teil) und magneti-

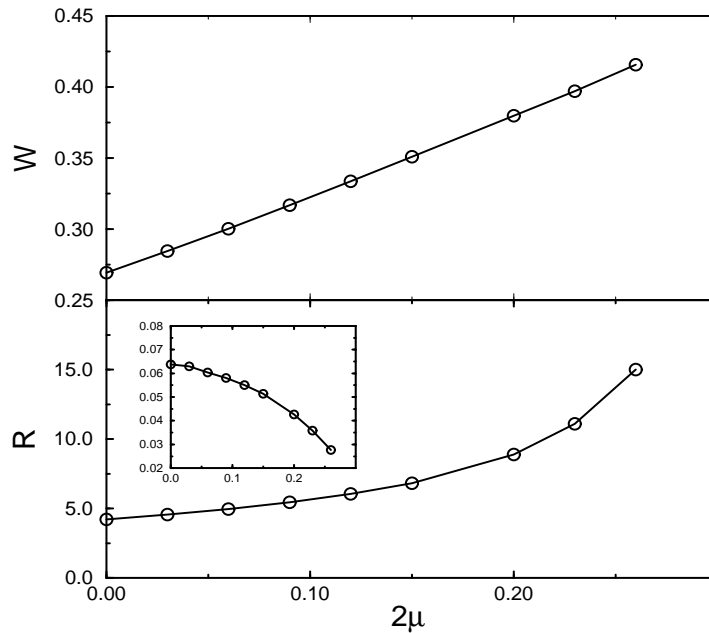


Abbildung 4.9: Amplituden des magnetischen Anteils der Solitonen (einfache Analyse, $K = 10.2$, $\alpha = 0.35$). Im oberen Teil ist die Amplitude des alternierenden Anteils zu sehen und im unteren Teil die Relativamplitude R (vgl. Glg. 2.19). Der eingesetzte Graph zeigt das Verhältnis W/R , d.h. die Amplitude des uniformen Anteils des magnetischen Solitons.

schen (unterer Teil) Solitonenbreiten für jeweils 2 verschiedene Magnetisierungen gegen die Zwischenkettenkopplung aufgetragen. Man sieht, daß die Kurven mit $m=2/100$ mit steigender Zwischenkettenkopplung stärker anwachsen als die Kurven mit $m=1/140$. Es ist also zu erwarten, daß die mit unserem Verfahren berechneten Solitonenbreiten für alle betrachteten Werte der Zwischenkettenkopplung mit der Magnetisierung wachsen.

Die magnetischen Breiten aus Abbildung 4.8 wurden mit einer Analyse ohne Unterscheidung von ξ_m^{al} und ξ_m^{un} erhalten und stimmen sehr gut mit ξ_m^{al} aus einer gemischten Analyse überein. Abbildung 4.11 zeigt den Vergleich von ξ_m^{al} und ξ_m^{un} in Abhängigkeit von μ aus einer gemischten Analyse. Für verschwindende Zwischenkettenkopplung ξ_m^{un} beträgt der Unterschied etwa 6%, und bei zunehmender Zwischenkettenkopplung nähert sich ξ_m^{un} zunehmend an ξ_m^{al} an. Insbesondere für den oben vorgeschlagenen Wert von $2\mu = 0.235$ stimmen ξ_m^{al} und ξ_m^{un} beinahe überein.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß bei einem Parametersatz mit $(\alpha, K, 2\mu) = (0.35, 10.2, 0.235)$ bei einer Magnetisierung von $m = 1/140$ ei-

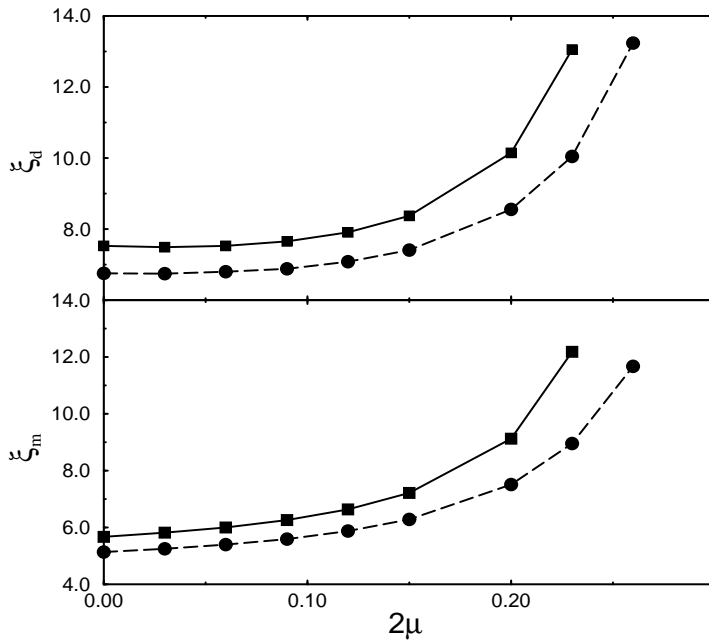


Abbildung 4.10: Vergleich mit höherer Magnetisierung (einfache Analyse, $K = 10.2$, $\alpha = 0.35$) Oberer Teil: elastische Solitonenbreiten für $m=2/100$ (Quadrate), und $m=1/140$ (Kreise). Unterer Teil: magnetische Solitonenbreiten für $m=2/100$ (Quadrate), und $m=1/140$ (Kreise).

ne recht gute Übereinstimmung der magnetischen Größen mit dem Experiment erreicht werden kann. Außerdem ist für diese Wahl der Parameter bei den DMRG-Daten der Unterschied zwischen den Breiten der beiden Anteile der lokalen Magnetisierung sehr gering, so daß die einfache Analyse hier ausreicht. Zu klären bleibt, ob dies auch für die experimentellen Daten zutrifft oder ob die Magnetisierungen aus Ref. [37] und damit auch der Wert $\xi_m^{\text{exp}} = 9.37$ entsprechend korrigiert werden müssen. Der vorgeschlagene Wert $2\mu = 0.235$ für die Zwischenkettencouplung liegt leider schon in dem Bereich, in dem das Verhältnis ξ_d/ξ_m beginnt, sich unregelmäßig zu verhalten (siehe Abbildung 4.8). Der Vorschlag kann daher bestenfalls zur Orientierung dienen, in welcher Größenordnung die Zwischenkettencouplung in CuGeO_3 liegt. Hinzu kommt, daß die Wahl $K = 10.2$ für die elastische Konstante keine sichere Grundlage hat. Der Wert wurde anhand einer DMRG-Analyse [52] der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität, bei der rein eindimensionale Ketten angenommen wurden, gewählt. Unter Berücksichtigung zweidimensionaler Effekte erhaltene Parametersätze [26] zur Beschreibung der Situation in CuGeO_3 werden in Abschnitt 4.6 betrachtet.

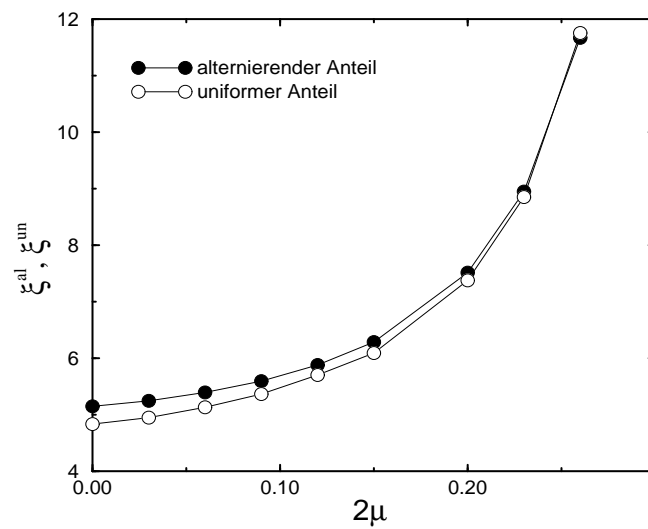


Abbildung 4.11: Vergleich der Breiten des uniformen und des alternierenden Anteils der Solitonen in Abhängigkeit der Zwischenkettenkopplung mit $m = 1/140$, $\alpha = 0.35$, $K = 10.2$ (gemischte Analyse)

4.4 Einfluß einer elastischen Dispersion

Die Annahme einer dispersionsfreien elastischen Energie im Hamiltonoperator 2.16 zur Beschreibung des reinen Phononensystems ist ebenfalls eine Vereinfachung. Der dort benutzte Ausdruck lautet in Fourier-Darstellung $E_{el} = \frac{K}{2} \sum_k |\delta_k|^2$. Er gewichtet den Beitrag jeder k -Komponente δ_k der Verzerrung mit demselben Faktor K . Realistischer ist es, einen Ausdruck der Form $E_{el} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{K} |\delta_k|^2$ anzunehmen, wobei die Dispersion \hat{K} k -Komponenten von $\delta_i \sim \sum_k \delta_k e^{ikr_i}$ mit einem Wellenvektor nahe $k=\pi$ „bevorzugt“. So wählen Schönfeld et al. $K(k) = K + 2\tilde{K} \cos(k)$ mit einem Minimum bei $k = \pi$ und finden, daß durch diese Wahl der Phasenübergang von der D-Phase in die I-Phase erster Ordnung ist [45]. Für die elastische Energie bedeutet dies

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_i K \delta_i^2 + 2\tilde{K} \delta_i \delta_{i+1} . \quad (4.19)$$

Wegen des zusätzlichen Terms in E_{el} muß das in Abschnitt 4.1 angegebene Verfahren leicht abgeändert werden. Glg. 4.3 wird zu

$$K \delta_i + \tilde{K} \delta_{i+1} = -J[\langle S_i S_{i+1} \rangle - \langle \langle S_i S_{i+1} \rangle \rangle] , \quad (4.20)$$

d.h. zur Berechnung der neuen Modulationen nach jedem Schritt muß ein lineares Gleichungssystem mit einer zyklischen tridiagonalen Koeffizientenmatrix gelöst werden.

Um Daten, die mit Hilfe von 4.20 erhalten werden, mit solchen zu vergleichen, die sich ohne elastische Dispersion mit $E_{el} = \frac{K_0}{2} \sum_i \delta_i^2$ ergeben, müssen K und \tilde{K} so gewählt werden, daß die elastische Energie (und damit die sich einstellende Dimerisierung) in der D-Phase mit Dispersion dieselbe ist wie ohne Dispersion, d.h. $K = K_0 + 2\tilde{K}$. Wir erwarten, daß eine solche Dispersion das Dimerisierungsprofil sinusförmiger macht und damit die Solitonenbreiten vergrößert. Die Ursache hierfür ist, daß für die gewählte Dispersion mit einem Minimum bei $k=\pi$ im Ausdruck für die elastische Energie die Moden mit Wellenvektor in der Nähe von π begünstigt werden. Höhere harmonische Anteile von δ_i , die zu einem stufenförmigeren Verzerrungsprofil beitragen würden, liegen weiter vom Minimum entfernt und werden dementsprechend benachteiligt [45].

Abbildung 4.12 zeigt den Einfluß einer solchen Dispersion auf die Solitonenbreiten für ein System mit $m=1/140$ bei einer Zwischenkettenkopplung von $2\mu=0.2$.

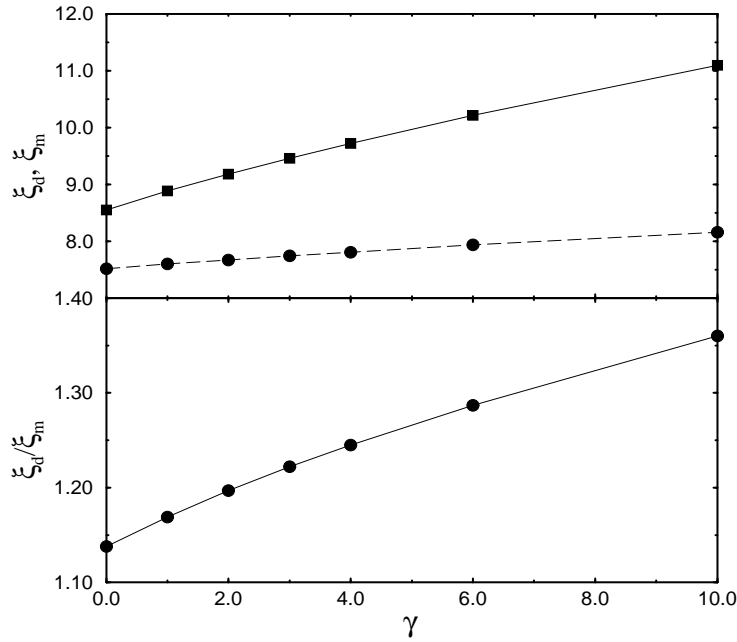


Abbildung 4.12: Solitonenbreiten in Abhängigkeit der elastischen Dispersion $\gamma = \tilde{K}/K_0$ für Ketten mit $L=140$, $m=1/140$, $K_0=10.2$, $\alpha=0.35$, $2\mu=0.2$. Die Quadrate zeigen die elastischen, die Kreise die magnetischen Solitonenbreiten.

Wie erwartet verbreitern sich die elastischen Solitonen mit größer werdender Dispersion. Der Anstieg ist etwa linear. Der Effekt auf den magnetischen Anteil ist bedeutend geringer, so daß das Verhältnis ξ_d/ξ_m ansteigt. Dies wird verständlich, wenn man bedenkt, daß die Dispersion primär an den Verzerrungen angreift. Das in Abschnitt 4.3 angesprochene Problem, daß das Verhältnis ξ_d/ξ_m sich bei Einschalten der Zwischenkettenkopplung vom beobachteten Wert ~ 1.4 wegbelegt, könnte ein Hinweis darauf sein, daß zur quantitativen Beschreibung des Experiments der Einfluß der K-Dispersion nicht vernachlässigt werden kann.

4.5 Einfluß einer Zwischenkettenfrustration

In dem in Abb. 2.7 schematisch dargestellten Spinmodell wird neben der Zwischenkettenkopplung μ eine Zwischenkettenfrustration β berücksichtigt. Diese kann ebenso wie die Zwischenkettenkopplung μ in einer mittleren Feld-Näherung dem Hamiltonian 4.18 hinzugefügt werden. Der zusätzlich entstehende Term lautet

$$H_b^{mf} = Z\mu\beta \sum_i (m_{i+1} + m_{i-1}) S_i^z, \quad (4.21)$$

wobei die m_i wie in Glg. 4.18 die aus dem vorhergehenden Schritt gewonnenen Magnetisierungen sind.

Weil die lokale Magnetisierung von Kette zu Kette entgegengesetzt ausgerichtet ist und alterniert, koppelt β Spins, die in dieselbe Richtung polarisiert sind. Dadurch wird der Effekt der direkten Zwischenkettenkopplung μ , die Energie durch negative Zeemanbeiträge abzusenken, teilweise aufgehoben. Der Beitrag der direkten Zwischenkettenkopplung lautet: $E_\mu \approx -Z\mu m_i^2$, der der Zwischenkettenfrustration: $E_\beta \approx Z\beta m_i(m_{i+1} + m_{i-1}) \approx 2Z\beta m_i^2$. Daher ist es sinnvoll, den Einfluß von β zu untersuchen, indem man, β variierend, die Größe $\mu_0 := \mu(1 - 2\beta)$ konstant hält.

Dies haben wir für Ketten mit $K=10.2$, $\alpha=0.35$ mit $\mu_0 = 0.1$ durchgeführt. In Abb. 4.13 sind die entsprechenden Solitonenbreiten zu sehen. Obwohl $\mu(1 - 2\beta)$ konstant gehalten wird, erkennt man ein starkes Ansteigen der Solitonenbreiten bei steigendem β . Anders als beim Erhöhen der reinen Zwischenkettenkopplung in Abschnitt 4.3 steigen die magnetische und elastische Solitonenbreite jedoch beide etwa gleich schnell, so daß das Verhältnis nur unwesentlich beeinflusst wird. Das Verhältnis ξ_d/ξ_m bleibt nahezu konstant. Die im unteren Teil von Abb. 4.13 erkennbare Abweichung vom konstanten Verhalten muß wohl auf Ungenauigkeiten in der numerischen Behandlung zurückgeführt werden. Bei höheren Werten für β beobachten wir ein Explodieren der Solitonenbreiten. Diese werden für Werte in der Nähe von $\beta = 0.3$ vergleichbar mit der Kettenlänge. In diesem Parameterbereich ist unsere Mean-Field Behandlung vermutlich nicht mehr zuverlässig.

Im oberen Teil von Abb.4.13 sind zusätzlich ξ_d, ξ_m für eine höhere mittlere Magnetisierung $m=2/100$ dargestellt (offene Symbole). Der qualitative Verlauf ist derselbe wie für die niedrigere Magnetisierung, jedoch liegen die Breiten mit $m=2/100$ auch hier deutlich über denen mit $m=1/140$, so daß auch die Einbeziehung einer Zwischenkettenfrustration leider keine Übereinstimmung mit der experimentellen Beobachtung, daß die Solitonenbreiten mit steigender Magnetisierung sinken, liefert.

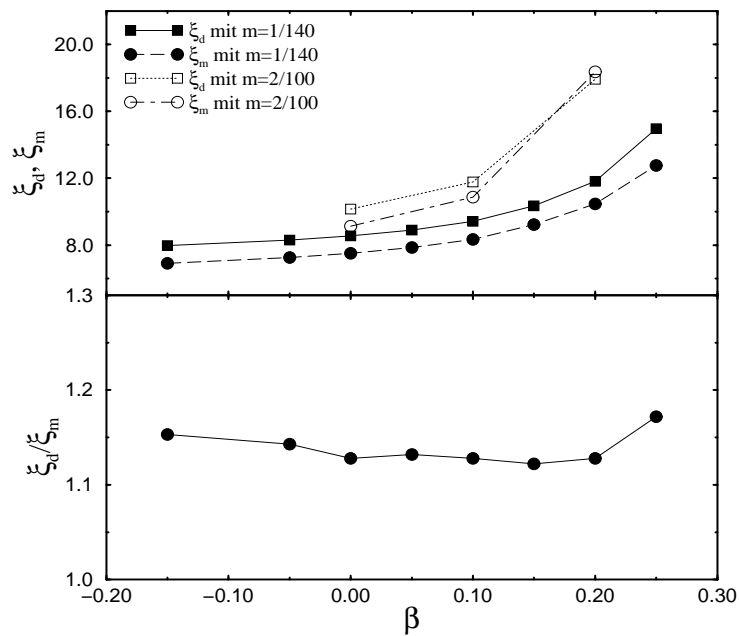


Abbildung 4.13: Solitonenbreiten für Ketten mit $K=10.2$, $\alpha = 0.35$ und deren Verhältnisse in Abhängigkeit der Zwischenkettenfrustration β . $\mu_0 := \mu(1 - 2\beta)$ wurde konstant auf 0.2 gehalten, β und μ entsprechend variiert.

4.6 Bezug zu CuGeO_3

In den letzten Abschnitten wurde das Verhalten der Solitonenformen in Abhängigkeit von Zwischenkettenkopplung, elastischer Dispersion und Zwischenkettenfrustration untersucht. Um eine Verbindung zu CuGeO_3 zu schaffen, wurden zusätzlich Rechnungen mit den Parametersätzen durchgeführt, die in Ref. [26] (vgl. Abschnitt 2.3.4) erhalten wurden. Diese Werte sind in Tabelle 4.1 aufgelistet.

	$\beta = 0.3$	$\beta = 0$	$\beta = -0.3$
$J[\text{meV}]$	13.2 ± 0.1	13.0 ± 0.2	13.0 ± 0.1
δ	0.068 ± 0.003	0.053 ± 0.0025	0.048 ± 0.003
α	0.28 ± 0.01	0.30 ± 0.01	0.30 ± 0.01
μ	0.299 ± 0.003	0.145 ± 0.002	0.094 ± 0.002

Tabelle 4.1: Kopplungsparameter aus der Analyse von C. Knetter [26]

Die Dimerisierung δ kann in unserem selbstkonsistenten Verfahren (vgl. Abschnitte 4.1, 4.3) nicht direkt als Eingabeparameter festgelegt werden, sondern stellt sich abhängig von der elastischen Konstante K im Laufe des Verfahrens ein. Um Solitonen zu erhalten, deren elastische Amplitude δ den Werten aus Tabelle 4.1 entspricht, wurde daher zunächst in der D-Phase gerechnet, um K so abzustimmen, daß die Dimerisierung hier den gewünschten Wert annimmt. Hierzu wurde genau ein DMRG-Schritt mit dem gewünschten δ als Anfangsdimerisierung durchgeführt und mit Hilfe der am Ende berechneten Erwartungswerte $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ K aus

$$K = -\frac{J}{\delta} [\langle S_0 S_1 \rangle - \langle\langle S_0 S_1 \rangle\rangle], \quad (4.22)$$

berechnet (vgl. Ref. 4.3).

Die erhaltenen Daten sind in Tabelle B.6 zusammengefaßt. Für die Parametersätze mit $\beta = 0$ und $\beta = -0.3$ liegen die Solitonenbreiten zu niedrig, für $\beta = 0.3$ zu hoch. Der einzige noch zur Verfügung stehende Parameter, der nicht durch die Werte in Tabelle 4.1 festgelegt ist, ist γ . Wie in Abschnitt 4.4 schon gesehen, können die Solitonenbreiten durch Erhöhen von γ vergrößert werden, so daß für die Fälle $\beta = 0$ und $\beta = -0.3$ Übereinstimmung von ξ_m mit dem experimentellen Wert erreicht werden kann. Hierbei wird von der magnetischen Solitonenbreite, die sich aus einer einfachen Analyse der lokalen Magnetisierung

ergibt, ausgegangen, da auch der experimentelle Wert ohne Unterscheidung der Breiten des uniformen und des alternierenden Anteils gewonnen wurde.

Für $\beta = 0$ und eine Magnetisierung von $m = 1/140$ erhält man mit diesem Vorgehen $\gamma = 7.231$ (vgl. Abbildung 4.14). Die elastische Solitonenbreite liegt für diesen Parametersatz mit $\xi_d \simeq 11.9$ um 14% niedriger als der experimentelle Wert $\xi_d = 13.6$. Wie jedoch in Abschnitt 4.3 bereits angemerkt, ist dieser Wert unsicherer als die magnetischen Solitonenbreiten aus Referenz [37], so daß wir uns hier an letzteren orientieren. Die Qualität der Fits liegt für diesen Parametersatz unabhängig von γ bei $\chi_{el}^2 \sim 10^{-5}$ für die Verzerrungen bzw. $\chi_m^2 \sim 10^{-3}$ für die Magnetisierungen.

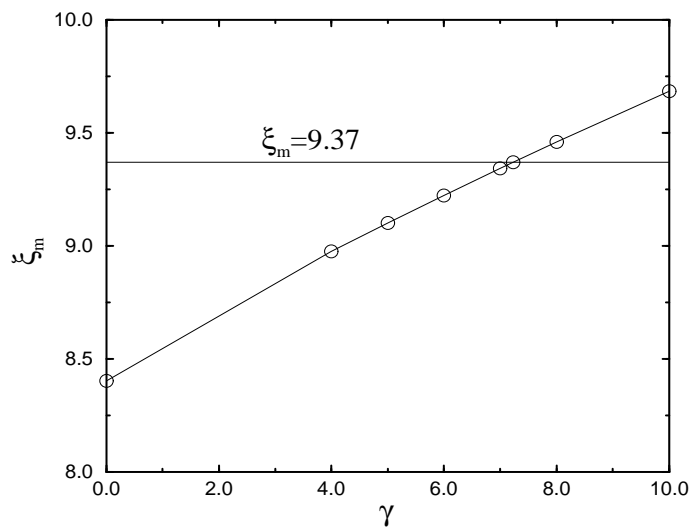


Abbildung 4.14: Magnetische Solitonenbreiten in Abhängigkeit der elastischen Dispersion, für $\beta = 0$. Für $\gamma = 7.231$ stimmt ξ_m mit dem experimentellen Wert überein.

Für $\beta = -0.3$ und eine Magnetisierung von $m = 1/140$ muß $\gamma \simeq 11.59$ gesetzt werden, um $\xi_m \simeq 9.37$ zu erhalten (vgl. Abbildung 4.14). Die elastische Solitonenbreite liegt hier mit $\xi_d \simeq 12.5$ noch etwas näher am experimentellen Wert $\xi_d = 13.6$ als im Falle von $\beta = 0$. Die Qualität der Fits ist mit $\chi_{el}^2 \sim 10^{-4}$ für die Verzerrungen etwas schlechter als beim oben betrachteten Parametersatz, während wir für die Magnetisierungen wie oben $\chi_m^2 \sim 10^{-3}$ erhalten.

Für den Parametersatz mit $\beta = 0.3$ liegt die magnetische Solitonenbreite mit $\xi_m = 10.51$ schon bei $\gamma = 0$ über dem experimentellen Wert. Um hier Überein-

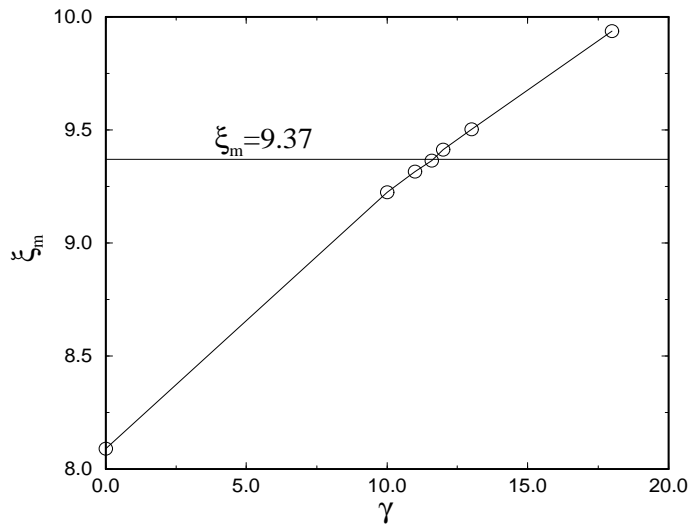


Abbildung 4.15: Wie Abbildung 4.14 mit $\beta = -0.3$. Für $\gamma = 11.59$ stimmt ξ_m mit dem experimentellen Wert überein.

stimmung zu erreichen, müßten negative Werte für γ verwendet werden. Hierfür zeigt es sich jedoch, daß die Verzerrungsprofile schon bei betraglich kleinen negativen Werten von γ sehr schlecht konvergieren und nur noch sehr schlecht durch die Jacobischen elliptischen Funktionen zu beschreiben sind. Ein Vorgehen wie bei den anderen beiden Parametersätzen ist daher hier nicht durchführbar.

Zusammenfassend können für die beiden Parametersätze mit $\beta = 0$ bzw. $\beta = -0.3$ die beiden angegebenen Werte $\gamma = 7.231$ bzw. $\gamma = 11.59$ vorgeschlagen werden. Für den zweiten Parametersatz ist, was die elastische Solitonenbreite angeht, die Übereinstimmung etwas besser, während die Qualität der Fits beim ersten Parametersatz am besten ist. Der Parametersatz mit $\beta = 0.3$ paßt dagegen im Rahmen der obigen Betrachtungen nicht ins Bild, da die magnetische Solitonenbreite hier zu hoch liegt und auch durch Hinzufügen einer elastischen Dispersion keine Übereinstimmung erreicht werden kann.

4.7 Numerische Details

Alle aufgeführten Rechnungen wurden mit 64 Zuständen durchgeführt. Als Maß für die Qualität der Konvergenz der Verzerrungsmuster nach s Schritten wurde

$$\epsilon := \max_{i=1\dots l} \frac{|\delta_i^s - \delta_i^{s-1}|}{\delta_{\max}} \quad (4.23)$$

verwendet. Hierbei ist δ_i^s die Dimerisierung am Gitterplatz i , die nach s Schritten erhalten wurde, und δ_{\max} die Amplitude des Verzerrungsmusters nach s Schritten. Für verschwindende Zwischenkettenkopplung wurde nach 10 Iterationen bei $\epsilon \simeq 10^{-3}$ abgebrochen. Das Hinzufügen einer Zwischenkettenkopplung bzw. Zwischenkettenfrustration bewirkt eine langsamere Konvergenz, so daß hier in der Regel 12 Iterationen nötig waren, um ein ϵ in der Größenordnung von 10^{-3} zu erhalten. Die Anzahl der Zustände wirkt sich nicht auf das Konvergenzverhalten aus. Läufe mit 32 Zuständen konvergierten nach ebenso viel Schritten wie Läufe mit 64 Zuständen. Auch die Solitonenbreiten hängen nicht sehr empfindlich von der Anzahl der Zustände ab. Mit 32 Zuständen erhaltene Solitonenbreiten weichen typischerweise um 1-10% von Solitonenbreiten, die mit 64 Zuständen erhalten wurden, ab.

Die Qualität der Fits hängt ebenso wie die Geschwindigkeit der Konvergenz von Zwischenkettenkopplung und Zwischenkettenfrustration ab. Allgemein liegt die quadratische Abweichung χ^2 der Fits für das Verzerrungsprofil (χ_{el}^2) um eine bis zwei Größenordnungen niedriger als die für die lokale Magnetisierung (χ_m^2). Bei verschwindender Zwischenkettenkopplung liegt χ_{el}^2 bei $\sim 10^{-6}$ und χ_m^2 bei etwa 10^{-4} - 10^{-5} . Bei Einführung einer Zwischenkettenkopplung wird χ^2 kaum beeinträchtigt. Die Zwischenkettenfrustration führt jedoch dazu, daß χ^2 um eine bis zwei Größenordnungen verschlechtert wird (vgl. auch Abschnitt 4.6).

Die Rechnungen wurden zum Teil auf einer Sun Ultra Enterprise 10000 mit 20 GB Arbeitsspeicher und zum Teil auf einer Sun Enterprise E4500/E5500 mit 5 GB Arbeitsspeicher durchgeführt. Der Arbeitsspeicherbedarf für eine Kette mit 140 Gitterplätzen unter Verwendung von 64 Zuständen liegt bei etwa 1.4 GB. Pro Iteration benötigt ein solcher Lauf ca. 12 Stunden Rechenzeit.

Kapitel 5

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde die Form von Solitonen in der inkommensurablen Phase von quasi-eindimensionalen Spin-Peierls-Systemen numerisch untersucht. Das prominenteste Beispiel einer Spin-Peierls-Substanz, CuGeO_3 , erlaubt den direkten Vergleich der numerischen Resultate mit dem Experiment. Sowohl der elastische als auch der magnetische Anteil der Solitonen konnten in dieser Substanz experimentell untersucht werden [53, 37].

Die verwendete Methode, der von White 1992 [38, 39] entwickelte Dichtematrixrenormierungsalgorithmus, wird in Kapitel 3 erläutert. Er ermöglicht es, den Grundzustand und die Grundzustandsenergie von eindimensionalen Quantensystemen mit hoher Genauigkeit zu ermitteln. Kapitel 3 beschreibt die beiden in den Referenzen [38, 39] vorgestellten auf der Idee der Dichtematrixrenormierung basierenden Algorithmen, den Infinite-Size-Algorithmus und den Finite-Size-Algorithmus. Im Anschluß wird auf die Berechnung von Erwartungswerten von Ein- und Zweiteilchenoperatoren eingegangen, und im letzten Abschnitt werden die zur Implementierung benötigten Datenstrukturen kurz beschrieben.

Abschnitt 4.1 stellt ein Verfahren vor, mit dessen Hilfe die für die I-Phase von Spin-Peierls-Systemen charakteristischen Verzerrungsmuster iterativ ermittelt werden können und diskutiert Resultate, die anhand dieses Verfahrens in Referenz [46] erhalten wurden. Es stellt sich heraus, daß die dort benutzten Fitfunktionen noch nicht allgemein genug sind. So müssen zur genaueren Analyse der Daten zwei verschiedene Solitonenbreiten für das Profil der lokalen Magnetisierung angenommen werden, eine für den alternierenden Anteil und eine weitere für den uniformen Anteil (vgl. Gleichung 4.8). Die erneute Analyse der Daten aus der genannten Referenz ergab, daß die beiden Breiten sich je nach Gesamtmagnetisierung um 6 – 40% unterscheiden. Es zeigt sich, daß die magnetischen

Solitonenbreiten, die sich aus einer einfachen Analyse ergeben, bei niedrigen Magnetisierungen der Breite des alternierenden Anteils entsprechen. Diese Beobachtungen erschweren den Vergleich zu den experimentellen Daten aus Referenz [37], da diese unter der Annahme einer einzigen Breite für alternierenden und uniformen Anteil der Magnetisierung ausgewertet wurden.

Die adiabatische Behandlung der Spin-Phononkopplung ist im Falle der Substanz CuGeO_3 a priori nicht gerechtfertigt. In Abschnitt 4.2 wird erläutert, daß ein antiadiabatischer Zugang zu einem dem adiabatischen analogen Hamiltonian führt, wenn man Terme, die eine elastische Zwischenkettenkopplung bewirken, in einer Mean-Field-Näherung behandelt. Für das in Abschnitt 4.1 beschriebene Verfahren ändert sich hierbei abgesehen von einer Umkehrung des Vorzeichens der Dimerisierungen in jedem Schritt nichts. Jedoch müssen die δ_i neu interpretiert werden, da sie sich als Erwartungswerte von Produkten zweier Spinoperatoren, die der Nachbarkette zugeordnet sind, ergeben (vgl. Glg. 4.14). Die einzige Änderung für das in Abschnitt 4.1 beschriebene iterative Verfahren ist eine Umkehrung der Verzerrungen in jedem Schritt. Am Ende von Abschnitt 4.2 wird der Einfluß dieser Umkehrung auf die Solitonenbreiten betrachtet und festgestellt, daß nur die Breite des elastischen Anteils der Solitonen bei hohen Magnetisierungen signifikant beeinflusst (verkleinert) wird.

Die Eindimensionalität ist in den meisten realen Systemen nur eine Näherung. In CuGeO_3 z.B. liegt eine antiferromagnetische Zwischenkettenkopplung vor, die etwa 10-30% der Kopplung innerhalb der Ketten beträgt [21, 22, 26]. In Abschnitt 4.3 wird eine Mean-Field-Näherung zur Behandlung dieser Kopplung vorgestellt, und es werden numerische Resultate, die mit dieser Erweiterung erhalten wurden, diskutiert. Die Zwischenkettenkopplung führt zu einer Vergrößerung sowohl der elastischen als auch der magnetischen Solitonenbreiten. Dies steht im Einklang mit der Tatsache, daß sowohl theoretische als auch numerische Betrachtungen, die von rein eindimensionalen Modellen ausgingen, zu niedrige Werte für die Solitonenbreiten ergaben. Bei einer Frustration von $\alpha = 0.35$ und mit einer elastischen Konstante $K = 10.2$ wird in Abschnitt 4.3 die Zwischenkettenkopplung in einem Bereich von $2\mu = 0$ bis $2\mu = 0.26$ variiert. Hierbei wird eine Magnetisierung von $m = 1/140$ gewählt, da für die elastische Zwischenkettenkopplung der einzige vorliegende experimentelle Wert dieser Magnetisierung zuzuordnen ist. Anhand des Vergleichs der magnetischen Solitonenbreite mit der experimentell bekannten wird für die Zwischenkettenkopplung ein Wert von $2\mu = 0.235$ vorgeschlagen. Es wird jedoch angemerkt, daß dieser aus zwei Gründen nur der Orientierung dienen kann. Zum einen ist die Wahl der

Parameter α, K recht unsicher, und zum anderen ist der Wert 2μ schon recht hoch, und das unregelmäßige Verhalten von ξ_d/ξ_m (vgl. Abb. 4.8) in diesem Bereich könnte ein Hinweis darauf sein, daß die Mean-Field-Behandlung der Zwischenkettenkopplung hier beginnt, an ihre Grenzen zu stoßen. Die in Abschnitt 4.1 diskutierten Solitonenbreiten nehmen im Widerspruch zum Experiment mit steigender Magnetisierung zu. In Abschnitt 4.3 wird daher bei einer höheren Magnetisierung das Verhalten der Solitonenbreite in Abhängigkeit der Zwischenkettenkopplung (vgl. Abb. 4.10) untersucht. Es zeigt sich, daß unabhängig von μ die Solitonenbreiten bei der höheren Magnetisierung höher liegen und daß der Unterschied mit steigender Zwischenkettenkopplung sogar größer wird. Der zum Experiment vorliegende Widerspruch, daß ξ_d, ξ_m mit der Magnetisierung wachsen, konnte also nicht durch Hinzufügen einer Zwischenkettenkopplung aufgelöst werden. Abschließend wird in Abschnitt 4.3 noch darauf eingegangen, wie die Zwischenkettenkopplung sich auf den Unterschied zwischen der Breite des uniformen Anteils und der des alternierenden Anteils der lokalen Magnetisierung auswirkt. Es zeigt sich, daß dieser Unterschied mit steigendem μ kleiner wird und bei $2\mu = 0.235$ vernachlässigbar ist, so daß, was die DMRG-Daten angeht, die einfache Analyse ohne Unterscheidung dieser beiden Breiten ausreicht. Zu klären bleibt, ob dies auch für die experimentellen Daten der Fall ist.

Im hierauf folgenden Abschnitt 4.4 wird auf den Einfluß einer Dispersion der elastischen Energie eingegangen (vgl. Glg. 4.19). Es zeigt sich, daß bei einer Wahl von K und \tilde{K} , die gewährleistet, daß die elastische Energie in der D-Phase gleichbleibe, die elastische Solitonenbreite mit wachsendem \tilde{K} schwach ansteigt. Die magnetische Solitonenbreite steigt auch, jedoch bedeutend schwächer, was darauf zurückgeführt wird, daß die elastische Dispersion nur an den Verzerrungen direkt angreift.

Neben einer Zwischenkettenkopplung spielt in CuGeO_3 auch eine Zwischenkettenfrustration β eine Rolle [22, 26]. In Abschnitt 4.5 wird diese ebenso wie die Zwischenkettenkopplung in einer Mean-Field-Näherung einbezogen. Der Einfluß auf die Breite der Solitonen wird untersucht. Es zeigt sich, daß die Solitonenbreiten mit steigendem β wachsen. Der Einfluß ist etwa ebenso stark wie der beim Erhöhen der Zwischenkettenkopplung, obwohl die effektive Zwischenkettenkopplung $\mu_0 := \mu(1 - 2\beta)$ konstant gehalten wurde. Desweiteren werden ξ_d und ξ_m etwa gleich stark beeinflusst. Das Verhältnis ξ_d/ξ_m bleibt abgesehen von kleinen Schwankungen, die auf den numerischen Fehler zurückgeführt werden, konstant.

Im letzten Abschnitt 4.6 wird schließlich auf drei in Referenz [26] vorgeschlagene Parametersätze $(\alpha, \mu, \beta, \delta)$ eingegangen. Die in diesen Parametersätzen

nicht festgelegte elastische Dispersion $\gamma = \tilde{K}/K_0$ wird benutzt, um bei einer Magnetisierung von $m = 1/140$ eine Übereinstimmung der magnetischen Solitonenbreite mit dem experimentellen Wert zu erhalten. Für die Parametersätze mit $\beta = 0$ bzw. $\beta = -0.3$ muß jeweils eine recht starke K-Dispersion angenommen werden ($\gamma \simeq 7$ bzw. $\gamma \simeq 12$), um Übereinstimmung zu erhalten. Für den Satz mit $\beta = 0.3$ liegt dagegen schon bei verschwindender Dispersion eine zu hohe magnetische Solitonenbreite vor. Negative Werte von γ führen schnell zu Instabilität und sind daher nicht geeignet, die Solitonenbreiten entsprechend zu verringern.

Anhang A

SVD-Zerlegung einer Matrix

In Abschnitt 3.2.1 wurde die sogenannte SVD-Zerlegung („Singular- Value-Decomposition“) einer Matrix verwendet. In diesem Anhang soll ein Beweis für die Existenz dieser „Zerlegung nach singulären Werten“ angegeben werden [54].

Satz (SVD-Theorem): Für eine reelle $l \times r$ -Matrix A existieren eine orthogonale $l \times l$ -Matrix U , eine diagonale ¹ $l \times r$ -Matrix D und eine orthogonale $r \times r$ -Matrix V mit

$$A = UDV^\dagger.$$

Bem.: Da die Matrizen U und V regulär sind, ist der Rang von A gerade durch die Anzahl der nicht verschwindenden Elemente von D gegeben.

Beweis: A nimmt als lineare Abbildung auf der kompakten Einheitssphäre S^{r-1} ein Maximum an, so daß man ein $x_1 \in S^{r-1}$ finden kann mit:

$$\sigma_1 := \|Ax_1\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

Zusammen mit x_1 wähle man nun eine Orthonormalbasis $\{x_1, x_2, \dots, x_r\}$ von \mathbb{R}^r . Weiterhin setze man $y_1 = \frac{Ax_1}{\|Ax_1\|}$ und finde y_2, \dots, y_l , so daß $\{y_1, y_2, \dots, y_l\}$ eine Orthonormalbasis von \mathbb{R}^l bilden. Mit diesen Vektoren bilde man die Matrizen

$$U_{(1)} = (y_1, y_2, \dots, y_l), \quad V_{(1)} = (x_1, \dots, x_r).$$

Betrachte nun die $l \times r$ -Matrix

$$D_{(1)} = U_{(1)}^\dagger A V_{(1)}$$

¹Der Begriff „diagonal“ wird hier auch im Falle $r \neq l$ in dem Sinne verwendet, daß $D_{i,j} = 0$, falls $i \neq j$.

mit den Einträgen $D_{(1)}^{i,j} = \langle y_i | A | x_j \rangle$. Wegen $Ax_1 = \|Ax_1\|y_1$ und der Orthogonalität der $\{y_i\}$ gilt $D_{(1)}^{1,1} = \|Ax_1\| = \sigma_1$ und $D_{(1)}^{i,1} = 0$ für $i > 1$. Die erste Spalte hat also nur einen nichtverschwindenden Eintrag, und $D_{(1)}$ nimmt die Form

$$D_{(1)} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & w^\dagger \\ 0 & A_{(1)} \end{pmatrix}$$

mit $w \in \mathbb{R}^{r-1}$ an. Desweiteren erhalten $V_{(1)}$ und $U_{(1)}^\dagger$ als orthogonale Matrizen die Norm im \mathbb{R}^r bzw. \mathbb{R}^l , so daß $\|Ax\| = \|D_{(1)}x\| \forall x \in \mathbb{R}^r$ und nach Konstruktion $\|D_{(1)}x\| \leq \sigma_1 \forall x \in \mathbb{R}^r$. Für den normierten Vektor $x := \frac{1}{\sqrt{\sigma_1^2 + w^\dagger w}}(\sigma_1, w^\dagger)^\dagger$ erhält man insbesondere:

$$D_{(1)}x = \frac{1}{\sqrt{\sigma_1^2 + w^\dagger w}} \begin{pmatrix} \sigma_1^2 + w^\dagger w \\ A_{(1)}w \end{pmatrix}$$

und

$$\|D_{(1)}x\|^2 = \sigma_1^2 + w^\dagger w + \frac{\|A_{(1)}w\|^2}{(\sigma_1^2 + w^\dagger w)}$$

Da die einzelnen Summanden alle positiv sind, erkennt man, daß die Bedingung $\|D_{(1)}x\| \leq \sigma_1$ nur erfüllt werden kann, wenn $w = 0$. $D_{(1)}$ hat also sogar die Form

$$D_{(1)} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & A_{(1)} \end{pmatrix}.$$

Für die $(l-1) \times (r-1)$ -Matrix $A_{(1)}$ können nun nach demselben Schema orthogonale Matrizen $U_{(2)} \in \mathbb{R}^{(l-1) \times (l-1)}$, $V_{(2)} \in \mathbb{R}^{(r-1) \times (r-1)}$ gefunden werden, mit

$$U_{(2)}^\dagger A_{(1)} V_{(2)} = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & A_{(2)} \end{pmatrix},$$

so daß

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_{(2)}^\dagger \end{pmatrix} D_{(1)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_{(3)} \end{pmatrix}.$$

Führt man dieses Verfahren fort, erhält man schließlich die Matrizen U und V als Produkte der bei dem Verfahren konstruierten orthogonalen Matrizen. Nach Multiplikation mit U von links und mit V^\dagger von rechts folgt die Behauptung. Der Satz läßt sich direkt auf den komplexen Fall $A \in \mathbb{C}^{l \times r}$ verallgemeinern. Die Matrizen U und V sind dann unitäre statt orthogonale Matrizen.

Anhang B

Simulationsergebnisse

m	2μ	K	ξ_d	ξ_m	W	R
1/140	0	18	10.1661	7.66726	0.215129	4.98829
1/92	0	18	10.7492	8.09689	0.214	5.11338
2/128	0	18	12.0575	8.80565	0.219727	5.09801
2/112	0	18	12.5811	9.08745	0.223408	4.93662
2/100	0	18	12.8759	9.29716	0.226889	4.72743
1/140	0	10.2	6.74937	5.14414	0.269337	4.22011
1/92	0	10.2	6.82921	5.2005	0.268519	4.23577
2/128	0	10.2	7.12943	5.42523	0.267669	4.3165
2/100	0	10.2	7.52641	5.67729	0.270879	4.347
1/140	0.03	10.2	6.74521	5.25005	0.284553	4.56165
1/140	0.06	10.2	6.79676	5.40484	0.300244	4.96864
1/140	0.09	10.2	6.88522	5.59406	0.316872	5.44763
1/140	0.12	10.2	7.07742	5.87601	0.333635	6.04834
1/140	0.15	10.2	7.40584	6.2853	0.350814	6.8265
1/140	0.2	10.2	8.55139	7.51423	0.37967	8.88345
1/140	0.23	10.2	10.044	8.952	0.397	11.098
1/140	0.26	10.2	13.2307	11.6718	0.415664	15.0128
1/140	0.29	10.2	25.529	19.0711	0.434642	22.541
1/92	0.03	10.2	6.82389	5.31129	0.283621	4.58007
2/100	0.03	10.2	7.491	5.81756	0.286033	4.67517
2/100	0.06	10.2	7.52628	6.00736	0.301913	5.05103
2/100	0.09	10.2	7.65277	6.26777	0.318417	5.48559
2/100	0.12	10.2	7.91078	6.64412	0.335351	5.99711
2/100	0.15	10.2	8.37334	7.21336	0.35267	6.60734
2/100	0.2	10.2	10.1455	9.13013	0.382052	7.93662
2/100	0.23	10.2	13.0498	12.1845	0.399878	8.99328
2/100	0.26	10.2	30.0666	37.5894	0.417738	10.3263

Tabelle B.1: Einfache Analyse mit Zwischenkettenkopplung ($\alpha = 0.35$)

α	K	ξ_d	ξ_m	ξ_m^{al}	ξ_m^{un}	ξ_d/ξ_m^{alt}	ξ_d/ξ_m^{un}	δ	W	R
0	4.68	18.475	16.371	16.539	14.088	1.117	1.3114	0.0229	0.205	9.368
0.1	5.51	13.620	11.898	11.952	10.736	1.139	1.2685	0.0253	0.217	7.659
0.2	6.82	10.381	8.692	8.712	8.054	1.192	1.2888	0.0269	0.233	6.127
0.241	7.56	9.294	7.613	7.622	7.103	1.219	1.3085	0.0273	0.241	5.568
0.35	10.2	6.749	5.144	5.150	4.838	1.310	1.3951	0.0275	0.269	4.220
0.4	11.61	5.507	4.157	4.158	3.909	1.324	1.409	0.0272	0.290	3.669
0.5	13.86	3.403	2.457	-	-	1.384	-	0.0273	0.370	2.767

Tabelle B.2: Verhältnis der Solitonenbreiten bei verschiedenen Werten der Frustration ($m=1/140$)

m	2μ	K	ξ_d	ξ_m^{al}	ξ_m^{un}	W	R
1/140	0	18	10.1661	7.67365	7.10725	0.215042	4.79945
1/92	0	18	10.7492	8.19588	7.20732	0.213235	4.76592
2/128	0	18	12.0575	9.34007	7.36336	0.217578	4.62034
2/112	0	18	12.5811	9.9915	7.43915	0.220969	4.4875
2/100	0	18	12.8759	10.6602	7.51469	0.224294	4.33291
1/140	0	10.2	6.74937	5.14959	4.83805	0.269218	4.09187
1/92	0	10.2	6.82921	5.32106	4.98885	0.283347	4.43738
2/128	0	10.2	7.12943	5.61034	5.02556	0.281542	4.38691
2/100	0	10.2	7.52641	5.90385	4.97097	0.26838	4.00087
1/140	0.03	10.2	6.74521	5.24903	4.95183	0.284598	4.42736
1/140	0.06	10.2	6.79676	5.3946	5.13528	0.300338	4.84529
1/140	0.09	10.2	6.88522	5.59588	5.3656	0.316735	5.33896
1/140	0.12	10.2	7.07742	5.87828	5.70578	0.333633	5.98023
1/140	0.15	10.2	7.40584	6.28619	6.09425	0.350762	6.71501
1/140	0.2	10.2	8.55139	7.51304	7.37818	0.379743	8.79683
1/140	0.23	10.2	10.044	8.94776	8.85259	0.397333	11.0182
1/140	0.26	10.2	13.2307	11.6686	11.7496	0.415724	15.0489

Tabelle B.3: Gemischte Analyse mit Zwischenkettenkopplung ($\alpha = 0.35$)

m	γ	ξ_d	ξ_m	W	R
1/140	0	8.551	7.514	0.3797	8.883
1/140	1	8.885	7.600	0.3793	8.983
1/140	2	9.182	7.671	0.3791	9.069
1/140	3	9.459	7.743	0.3788	9.151
1/140	4	9.723	7.809	0.3786	9.228
1/140	6	10.212	7.934	0.378	9.347
1/140	10	11.095	8.160	0.377	9.592

Tabelle B.4: Einfluß einer K-Dispersion (vgl. Abb. 4.12), $K_0 = 10.2$, $\alpha = 035$

m	2μ	β	ξ_d	ξ_m	ξ_m^{al}	ξ_m^{un}	W	R
1/140	0.1538	-0.15	7.971	6.914	6.916	6.783	0.369	7.912
1/140	0.1818	-0.05	8.298	7.259	7.257	7.111	0.375	8.475
1/140	0.2	0	8.551	7.514	7.513	7.378	0.37967	8.883
1/140	0.222	0.05	8.902	7.862	7.860	7.733	0.3846	9.422
1/140	0.25	0.1	9.419	8.347	8.347	8.250	0.3912	10.189
1/140	0.286	0.15	10.357	9.233	9.232	9.155	0.3985	11.476
1/140	0.33	0.2	11.814	10.469	10.463	10.493	0.4088	13.339
1/140	0.4	0.25	14.953	12.754	12.739	13.086	0.4243	16.652
2/100	0.2	0	10.146	9.134	9.364	8.530	0.3821	7.9367
2/100	0.25	0.1	11.7757	10.877	11.196	8.755	0.3935	8.617
2/100	0.333	0.2	17.922	18.352	19.381	9.026	0.4092	9.760

Tabelle B.5: Einfluß einer Zwischenkettenfrustration

m	μ	β	α	K_0	γ	ξ_d	ξ_m	ξ_m^{al}	ξ_m^{un}	W	R
1/140	0.145	0	0.3	5.25	0	9.094	8.403	8.400	8.598	0.463	12.347
1/140	0.145	0	0.3	5.25	4	10.761	8.976	8.966	9.406	0.464	13.323
1/140	0.145	0	0.3	5.25	5	11.115	9.102	9.0974	9.559	0.465	13.530
1/140	0.145	0	0.3	5.25	6	11.456	9.223	9.213	9.650	0.465	14.023
1/140	0.145	0	0.3	5.25	7	11.789	9.343	9.333	9.905	0.465	13.920
1/140	0.145	0	0.3	5.25	7.231	11.861	9.370	9.365	9.922	0.465	13.962
1/140	0.145	0	0.3	5.25	8	12.109	9.460	9.449	9.916	0.465	14.403
1/140	0.145	0	0.3	5.25	10	12.732	9.684	9.674	10.221	0.466	14.832
1/92	0.145	0	0.3	5.25	7.231	12.635	9.928	9.920	10.353	0.460	14.402
2/100	0.145	0	0.3	5.25	7.231	36.302	35.587	34.957	14.409	0.456	10.588
1/140	0.299	0.3	0.28	4.14	0	11.735	10.510	10.501	11.311	0.509	17.144
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	0	8.718	8.091	8.088	8.159	0.440	11.222
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	10	12.072	9.224	9.215	9.563	0.442	12.961
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	11	12.345	9.315	9.309	9.755	0.442	13.457
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	11.59	12.499	9.364	9.358	9.711	0.442	13.402
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	12	12.613	9.412	9.403	9.824	0.442	13.548
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	13	12.872	9.502	9.482	9.857	0.442	13.360
1/140	0.094	-0.3	0.3	5.69	18	14.136	9.936	9.928	10.443	0.442	13.981
1/92	0.094	-0.3	0.3	5.69	11.59	13.427	9.929	9.914	10.199	0.437	13.296
2/100	0.094	-0.3	0.3	5.69	0	9.98192	9.631	9.681	9.778	0.438	9.305
2/100	0.094	-0.3	0.3	5.69	11.59	42.725	36.644	36.574	38.248	0.433	10.709

Tabelle B.6: Betrachtung der in Referenz [26] vorgeschlagenen Parametersätze.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Hase, I. Terasaki and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993)
- [2] M. C. Cross, Phys. Rev. B **20**, 4606 (1979)
- [3] J. W. Bray, H. R. Hart, L. V. Interrante, I. S. Jacobs, J. S. Kasper, G.D. Watkins and S. H. Wee, Phys. Rev. Lett. **35**, 744 (1975)
- [4] J.W. Bray I.S. Jacobs, Phys. Rev. B **14**, 3036 (1976)
- [5] M. Isobe and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1178 (1996)
- [6] Y. Fujii, H. Nakao, T. Yosihama, M. Nishi, K. Nakajima, K. Kakurai, M. Isobe, Y. Ueda and H. Sawa, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 326 (1997)
- [7] Assa Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* Graduate Texts in Contemporary Physics (Springer, New York, 1994)
- [8] J. P. Boucher and L. P. Regnault, J. Phys. I France **6**, 1939 (1996)
- [9] M. Braden, G. Wilkendorf, J. Lorenzana, M. Aïn, G. J. McIntyre, M. Behruzi, G. Heger, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **54**, 1105 (1996)
- [10] T. Lorenz, Doktorarbeit, Universität zu Köln (1998)
- [11] M.E. Fisher J. Bonner, Phys. Rev. **135**, 640 (1964)
- [12] G. Castilla, S. Chakravarty and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **75**, 1823 (1995)
- [13] J. Riera and A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995)
- [14] K. Fabricius, A. Klümper, U. Löw, B. Büchner, T. Lorenz, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **57**, 1102 (1998)

- [15] G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **57**, R14004 (1998)
- [16] M. C. Cross and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979)
- [17] R. Werner, C. Gros and M. Braden, **cond-mat/9810038** (1998)
- [18] M. Braden, E. Ressouche, B. Büchner, R. Keßler, G. Heger, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **57**, 11497 (1998)
- [19] L. P. Regnault, M. Aïn, B. Hennion, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, Phys. Rev. B **53**, 5579 (1996)
- [20] J. C. Bonner, H. W. J. Blöte, J. W. Bray and I. S. Jacobs, J. Appl. Phys. **50**, 1810 (1979)
- [21] M. Nishi, O. Fujita and J. Akimitsu, Phys. Rev. B **50**, 6508 (1994)
- [22] G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **79**, 163 (1997)
- [23] W. Geertsma and D. Khomskii, Phys. Rev. B **54**, 3011 (1996)
- [24] D. Khomskii, W. Geertsma and M. Mostovoy, Czech. Journ. of Physics **46**, 3239 (1996)
- [25] J.B. Goodenough, *Magnetism and the chemical Bond* (John Wiley&Sons, New York, 1963)
- [26] Ch. Knetter, Diplomarbeit, Universität zu Köln (1999)
- [27] K. Hirota, D. E. Cox, J. E. Lorenzo, G. Shirane, J. M. Tranquada, M. Hase, K. Uchinokura, H. Kojima, Y. Shibuya and I. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **73**, 736 (1994)
- [28] Ch. Knetter G. S. Uhrig, (in Vorbereitung)
- [29] S. M. Bhattacharjee, T. Nattermann and C. Ronnewinkel, Phys. Rev. B **58**, 2658 (1998)
- [30] T. Nakano and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **49**, 1679 (1980)
- [31] T. Nakano and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 2489 (1981)
- [32] J. Zang, S. Chakravarty and A. R. Bishop, Phys. Rev. B **55**, R14705 (1997)

- [33] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publisher, New York, 1964)
- [34] V. Kiryukhin, B. Keimer, J. P. Hill and A. Vigliante, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4608 (1996)
- [35] Y. Fagot-Revurat, M. Horvatić, C. Berthier, J. P. Boucher, P. Ségransan, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1861 (1996)
- [36] M. Horvatić, C. Berthier, Y. Fagot-Revurat, N. Piegay, M. E. Hanson, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, *Physica* **B246-247**, 22 (1998)
- [37] M. Horvatić, Y. Fagot-Revurat, C. Berthier, G. Dhalenne and A. Revcolevschi, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 420 (1999)
- [38] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992)
- [39] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993)
- [40] K.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975)
- [41] F. Schönfeld, Doktorarbeit, Universität zu Köln (1999)
- [42] R.P.Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures* (Benjamin, Reading, 1972)
- [43] E.R. Davidson, *J. Comput. Phys.* **17**, 87 (1975)
- [44] A. E. Feiguin, J. A. Riera, A. Dobry and H. A. Ceccatto, *Phys. Rev. B* **56**, 14607 (1997)
- [45] F. Schönfeld, G. Bouzerar, G. S. Uhrig and E. Müller-Hartmann, *Eur. Phys. J. B* **5**, 521 (1998)
- [46] G. S. Uhrig, F. Schönfeld, J.P. Boucher and M. Horvatić, *Phys. Rev. B* **60**, 9468 (1999)
- [47] G. S. Uhrig, F. Schönfeld and J.P. Boucher, *Europhys. Lett.* **41**, 431 (1998)
- [48] V. Kiryukhin, B. Keimer, J. P. Hill, S. M. Coad and D. McK. Paul, *Phys. Rev. B* **54**, 7269 (1996)
- [49] G. S. Uhrig, cond-mat/9908225 (1999)

- [50] G. S. Uhrig, (Persönliche Mitteilung.)
- [51] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995)
- [52] A. Klümper, R. Raupach and F. Schönfeld, Phys. Rev. B **59**, 3612 (1999)
- [53] V. Kiryukhin and B. Keimer, Phys. Rev. B **52**, 704 (1995)
- [54] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations* (Johns Hopkins University Press, New York, 1997)